

LE JOURNAL DE PHYSIQUE

ET

LE RADIUM

LE GROUPE D'INVARIANCE ASSOCIÉ AUX ROTATEURS RELATIVISTES ET LA THÉORIE BILOCALE

Par F. HALBWACHS,

Institut Henri-Poincaré, Paris.

J. M. SOURIAU,

Faculté des Sciences, Marseille.

J. P. VIGIER,

Institut Henri-Poincaré, Paris.

Résumé. — Trois résultats sont obtenus dans cet article :

1° on montre, par une démonstration très générale, que l'ensemble des constantes fondamentales du mouvement qui peuvent être tirées de chaque groupe d'invariance d'un Lagrangien donné sur une ligne d'univers, fournit des crochets de Poisson classiques qui satisfont à des relations identiques aux relations de commutation de l'algèbre de Lie du groupe ;

2° toute particule comportant des variables internes peut être représentée par un rotateur « bilocal » formé de deux tétrapodes relativistes localisés en deux points différents ;

3° les transformations de jauge à un et trois paramètres du formalisme spinoriel habituel peuvent être traduites dans le formalisme des tétrapodes, avec une interprétation cinématique évidente.

Abstract. — Three noteworthy results are established in this paper : First, it is shown in the frame of a very general treatment, that the set of fundamental constants of the motion which can be derived from each invariance group of a given line-Lagrangian gives rise to classical Poisson Brackets which fulfil relations identical to the Lie algebraic relations of the group. Secondly, any particle endowed with internal variables can be represented by a " bilocal " rotator composed of two relativistic tetrads localized at two different points. Finally, the usual one-parameter and two-parameter gauge transformations in spinor form can be translated into tetrad form with an obvious kinematical interpretation.

Introduction. — On se propose d'étudier du point de vue de la théorie des groupes, la dynamique de la particule relativiste en mouvement dans l'univers physique. Par univers physique, nous entendons l'espace-temps de Minkowski possédant une orientation déterminée — plus précisément, un sens du temps relié à l'existence d'un cône de lumière avec une nappe future déterminée, et une orientation déterminée de l'espace telle qu'elle peut être mise en évidence par les phénomènes qui ne conservent pas la parité. En outre, cet univers peut être le siège d'un champ extérieur capable d'agir sur la particule en chaque point. D'autre part, la particule sera, au moins au début, considérée comme strictement localisée en un point d'univers x_μ qui décrit une ligne d'univers \mathcal{L} . Outre sa position, elle comportera des « variables in-

ternes » $b^{(\lambda)}$ variant avec le temps et sur la variance et la nature desquelles nous ne ferons d'abord aucune hypothèse restrictive. Toutes les propriétés dynamiques de la particule seront déduites d'un Lagrangien dépendant de $x_\mu, \dot{x}_\mu, b^{(\lambda)}, \dot{b}^{(\lambda)}$ (nous désignons par un point la dérivation par rapport au temps propre τ de la particule, c'est-à-dire le long de la ligne \mathcal{L}). Pour traiter ce problème, démontrons d'abord de façon purement mathématique une propriété très générale.

I. Le théorème de Noether et les variables dynamiques. — Considérons les variables suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{ll} \tau & (\text{à valeurs réelles}) \\ Q \equiv \Phi(\tau) & (\text{à valeurs dans } R^n) \\ L \equiv f(\tau, Q, \dot{Q}) & (\text{à valeurs réelles}) \end{array} \right. \quad (1)$$

et l'intégrale :

$$\mathcal{A}_0^1 \equiv \int_{\tau_0}^{\tau_1} L \, d\tau.$$

Nous pouvons évidemment poser $y \equiv Q$ et écrire :

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_0^1 &\equiv \int_{\tau_0}^{\tau_1} [f(\tau, Q, y) + P(\dot{Q} - y)] \, d\tau \\ \mathcal{A}_0^1 &= [PQ]_{\tau_0}^{\tau_1} + \int_{\tau_0}^{\tau_1} [f(\tau, Q, y) - P\dot{Q} - Py] \, d\tau. \end{aligned} \quad (2)$$

P étant une fonction quelconque de τ à valeurs dans le dual de R^n (nous supposons que Q et y sont des colonnes et que P est une ligne. Leurs éléments seront respectivement désignés par Q^λ , y^λ , P_λ). Si δ représente une variation de la fonction Φ , nous aurons :

$$\begin{aligned} \delta \mathcal{A}_0^1 &= [P \cdot \delta Q]_{\tau_0}^{\tau_1} \\ &+ \int_{\tau_0}^{\tau_1} \left[\left(\frac{\partial L}{\partial Q} - \dot{P} \right) \cdot \delta Q + \left(\frac{\partial L}{\partial y} - P \right) \cdot \delta y \right] \, d\tau. \end{aligned} \quad (3)$$

Nous pouvons profiter de l'indétermination de P pour poser

$$P \equiv \frac{\partial L}{\partial y}$$

afin de nous débarrasser du coefficient de δy dans (3). Nous obtenons alors les équations de Lagrange :

$$\frac{\partial L}{\partial y} = P \quad \frac{\partial L}{\partial Q} = \dot{P} \quad y \equiv \dot{Q} \quad (4)$$

en tant que conditions nécessaires et suffisantes pour que :

$$[\delta \Phi_{(\tau_0)} = \delta \Phi_{(\tau_1)} = 0] \Rightarrow [\delta \mathcal{A}_0^1 = 0]. \quad (5)$$

La forme même de (4) montre que les conditions (5) ne dépendent pas du choix de τ_0 et τ_1 .

Considérons, maintenant, une variation quelconque δQ fonction de τ et de Q , mais qui ne s'annule pas nécessairement pour les valeurs τ_0 et τ_1 . On a alors :

$$\delta \mathcal{A}_0^1 = \int_{\tau_0}^{\tau_1} \delta L \, d\tau.$$

Si la condition (4) est remplie, (2) montre qu'on obtiendra :

$$\delta \mathcal{A}_0^1 = [P \cdot \delta Q]_{\tau_0}^{\tau_1}.$$

Cette relation nous conduit au théorème de Noether [1] : A toute variation δQ fonction de Q et de τ , les équations de Lagrange permettent d'associer une fonction u de P, Q, τ : $u = P \cdot \delta Q$ telle que la différence de ses valeurs en τ_0 et τ_1 , est égale à la variation de l'intégrale \mathcal{A} prise de τ_0 à τ_1 :

$$\delta \mathcal{A}_0^1 = u_{(\tau_0)} - u_{(\tau_1)}. \quad (6)$$

Ce théorème peut être appliqué en particulier au cas où l'on considère un groupe de Lie G à p paramètres agissant dans l'espace (Q, τ) et conservant τ . Les générateurs infinitésimaux δ_J de ce groupe fournissent alors p fonctions fondamentales :

$$u_J = P \cdot \delta_J Q. \quad (7)$$

Appelons *phase* le couple de variables $\begin{pmatrix} P \\ Q \end{pmatrix}$ et *variable dynamique* toute variable qui est fonction de la phase et de τ . Nous pouvons associer à chaque variable dynamique scalaire u une différentielle d_u définie par :

$$d_u(\tau) = 0 \quad d_u(Q^\lambda) = \frac{\partial u}{\partial P_\lambda} \quad d_u(P_\lambda) = -\frac{\partial u}{\partial Q^\lambda}.$$

De plus, si u et v sont deux variables dynamiques, l'expression :

$$[u, v] = d_u(v) = \frac{\partial u}{\partial P_\lambda} \frac{\partial v}{\partial Q^\lambda} - \frac{\partial u}{\partial Q^\lambda} \frac{\partial v}{\partial P_\lambda}$$

sera le *crochet de Poisson* de u et v . Les différentielles associées à ces variables dynamiques satisfont à la relation :

$$d_u d_v - d_v d_u = d_{[u, v]}. \quad (8)$$

En appliquant cette relation à une troisième variable dynamique w on obtient l'*identité de Jacobi* :

$$[u, [v, w]] + [v, [w, u]] + [w, [u, v]] = 0.$$

Appliquons ces considérations aux variables dynamiques définies par (7). Nous obtenons immédiatement :

$$\begin{cases} d_{u_j}(Q) = \delta_j Q \\ d_{u_j}(P) = -P \frac{\partial}{\partial Q} (\delta_j Q) \\ d_{u_j}(\tau) = 0. \end{cases} \quad (9)$$

D'où nous tirons :

$$\begin{aligned} [u_j, u_k] &= d_{u_j}(P \cdot \delta_k Q) = d_{u_j} P \cdot \delta_k Q + P \cdot d_{u_j}(\delta_k Q) \\ &= -P \cdot \frac{\partial}{\partial Q} (\delta_j Q) \delta_k Q + P \cdot \frac{\partial}{\partial Q} (\delta_k Q) \cdot \delta_j Q \\ [u_j, u_k] &= P \cdot (\delta_j \delta_k - \delta_k \delta_j) Q. \end{aligned} \quad (10)$$

Mais les générateurs infinitésimaux δ_j , d'un groupe de Lie satisfont aux relations de commutation

$$\delta_j \delta_k - \delta_k \delta_j = T_{jk}^i \delta_i$$

où les coefficients de structure T_{jk}^i sont des constantes qui restent invariantes dans tout homomorphisme du groupe. De la relation (10), nous tirons donc l'identité :

$$[u_j, u_k] = T_{jk}^i u_i \quad (11)$$

qui relie au moyen des coefficients de structure les fonctions fondamentales engendrées par les générateurs du groupe G .

La relation (11) peut être considérée comme la forme infinitésimale d'une propriété finie très simple. En effet, considérons une transformation bi-différentiable $Q' = F(Q)$, nous pouvons lui associer une transformation corrélative des variables P correspondantes en posant :

$$P' \cdot dQ' = P \cdot dQ \quad (12)$$

ce qui donne :

$$P' = P \cdot dQ / dQ'.$$

De même, cette transformation qui laisse invariante la forme $P \cdot \delta Q$ laisse évidemment aussi invariante la forme différentielle $dP \cdot \delta Q - \delta P \cdot dQ$. C'est donc une *transformation canonique* dans l'espace de phase.

Si maintenant, nous considérons un groupe G de transformations agissant sur Q , nous obtenons, en appliquant (12) à chaque transformation de G , un isomorphisme entre G et un groupe Γ de transformations canoniques. Il est facile de voir que, dans cet isomorphisme, chaque transformation infinitésimale δ_i du groupe G , correspondra à une transformation canonique infinitésimale du groupe Γ qui coïncide avec la différentielle d_{uj} définie par (9). L'invariance des relations de commutation par un isomorphisme nous donne alors la relation :

$$d_{uj} d_{uk} - d_{uk} d_{uj} = T_{jk}^i d_{ui}. \quad (13)$$

Mais, d'après (8), on peut écrire le premier membre de (13) : $d_{[uj, uk]}$ ce qui donne l'identité (11).

Signalons que les résultats démontrés ici peuvent facilement être étendus à des cas plus généraux, par exemple à des transformations agissant aussi sur le paramètre τ (on exprimera τ et Q en fonction d'un paramètre arbitraire s) ou au cas de Lagrangiens dépendant de dérivées supérieures (pour le cas des dérivées secondes, cf. plus loin, section 4).

Nous allons appliquer maintenant les résultats généraux ci-dessus au problème de la particule. A chacune des variables définies plus haut :

$$Q \equiv (x_\mu, b^{(\lambda)})$$

correspondra son moment canoniquement conjugué :

$$P \equiv \left\{ G_\mu = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_\mu}, \quad \beta^{(\lambda)} = \frac{\partial L}{\partial \dot{b}^{(\lambda)}} \right\}$$

et à chaque générateur infinitésimal δ_i d'un groupe de Lie G , correspondra une fonction :

$$u_i = P \cdot \delta_i Q = G_\mu \delta_i x_\mu + \beta^{(\lambda)} \delta_i b^{(\lambda)}.$$

Le groupe G peut être formé de deux sortes de transformations : les *glissements* qui agissent sur les x_μ , et les *transformations de jauge* qui agissent

seulement sur les variables internes $b^{(\lambda)}$, si bien que le groupe G se présente généralement comme un produit direct d'un groupe de glissements et d'un groupe de jauge.

En ce qui concerne les glissements, nous pouvons considérer que, si le Lagrangien dépend des coordonnées x_μ , cette dépendance exprime l'influence du champ extérieur $A(x)$, et par conséquent nous pouvons supposer que L ne dépend de x_μ que par l'intermédiaire de A_μ , qui est une fonction vectorielle de x_μ . Ainsi tout générateur infinitésimal δ_i du groupe des glissements produit un déplacement infinitésimal de la ligne \mathcal{L} dans un champ extérieur immobile, si bien que la variation correspondante de l'intégrale \mathcal{A}_0^1 est :

$$\delta_i \mathcal{A}_0^1 = \int_{\tau_0}^{\tau_1} \frac{\partial L}{\partial A_\mu} \frac{\partial A_\mu}{\partial x_\nu} \delta_i x_\nu d\tau$$

et que l'équation (6) devient :

$$u_i(\tau_1) - u_i(\tau_0) = \int_{\tau_0}^{\tau_1} \frac{\partial L}{\partial A_\mu} \frac{\partial A_\mu}{\partial x_\nu} \delta_i x_\nu d\tau$$

soit, sous forme différentielle :

$$\dot{u}_i = \frac{\partial L}{\partial A_\mu} \frac{\partial A_\mu}{\partial x_\nu} \delta_i x_\nu.$$

Ou enfin, plus simplement :

$$\dot{u}_i = \frac{\partial L}{\partial A_\mu} \delta_i A_\mu \quad (14)$$

$\delta_i A_\mu$ représentant la variation subie par le champ extérieur A_μ sous un glissement infinitésimal $\delta_i x$ dans l'espace-temps.

Nous voyons, en particulier que les transformations infinitésimales δ_i qui laissent invariante l'intégrale d'action \mathcal{A}_0^1 sont données par la relation :

$$\frac{\partial L}{\partial A_\mu} \delta_i A_\mu = 0.$$

Il peut exister pour un champ de structure donné certaines formes de Lagrangien qui définissent un sous-groupe δ_i de glissements pour lesquels les vecteurs $\partial L / \partial A_\mu$ et $\delta_i A_\mu$ sont orthogonaux. C'est le cas, par exemple, pour les rotations spatiales dans un champ à symétrie (spatiale) sphérique, ou pour les translations dans un plan orthogonal à un champ uniforme.

L'étude des glissements infinitésimaux dans un champ extérieur fournit les lois de la dynamique d'une particule relativiste en rotation soumise à ce champ. L'un de nous [2] a utilisé cette méthode pour traiter le problème de la précession du spin d'une particule chargée en mouvement dans un champ électromagnétique. Néanmoins le cas de la particule *libre*, en l'absence de champ extérieur, qui paraît limité à un « univers physique » très particulier, est en fait très important, car c'est toujours dans ce cas qu'on se place pour construire

des modèles du niveau subquantique de la matière, niveau où le concept de champ continu perd toute signification et doit laisser la place à la notion d'interaction, deux particules subquantiques en interaction devant être considérées comme formant un édifice unique pendant la durée de l'interaction. Dans toute la suite, nous allons nous placer dans le cas de la particule libre en supposant $A_\mu = 0$. Alors, le Lagrangien ne dépend plus explicitement de x_μ et reste *invariant sous un glissement quelconque*. De plus, en ce qui concerne les transformations de jauge, nous nous limiterons également à celles qui laissent le Lagrangien invariant, si bien qu'à partir de maintenant, nous allons seulement considérer le *groupe d'invariance du Lagrangien étudié*.

Dans ces conditions, l'équation (14) devient :

$$\dot{u}_i = 0$$

c'est-à-dire :

$$v_i \equiv P \cdot \delta_i Q \equiv G_\mu \delta_i x_\mu + \beta^{(\lambda)} \delta_i b^{(\lambda)} = \text{constante.}$$

Chaque générateur infinitésimal du groupe d'invariance donne ainsi naissance à une *constante du mouvement*, et ces constantes fondamentales exprimées en fonction des variables canoniques, obéissent aux relations algébriques (11) sur les crochets de Poisson.

II. Le groupe des glissements et la théorie bilocale. — Les Lagrangiens qu'on peut avoir à considérer admettent différents types de groupes d'invariance. Mais, dans le cas de la particule libre, le groupe d'invariance comporte nécessairement (éventuellement comme sous-groupe) le groupe général des glissements dans l'espace-temps, c'est-à-dire le *groupe inhomogène de Lorentz*. Dans cette section, nous appliquerons le théorème précédent au groupe de Lorentz, sans spécifier les variables internes.

Comme on le sait, les générateurs infinitésimaux du groupe inhomogène de Lorentz sont :

1° les opérateurs \mathcal{T}_μ des translations infinitésimales dans l'espace-temps. Ceux-ci agissent uniquement sur les x_μ et sont donnés par :

$$\mathcal{T}_\mu x_\lambda = \delta_{\mu\lambda}$$

2° les opérateurs $\mathcal{M}_{\mu\nu}$ des rotations infinitésimales dans l'espace-temps, qui agissent à la fois sur les x_μ et sur les variables internes. Sur les premiers, leur action est exprimée par :

$$\mathcal{M}_{\mu\nu} x_\lambda = x_\mu \delta_{\nu\lambda} - x_\nu \delta_{\mu\lambda}$$

Sur les variables internes, la forme explicite des opérateurs $\mathcal{M}_{\mu\nu}$ dépend de la variance de ces variables.

Pour former les constantes fondamentales du mouvement correspondant à ces opérateurs, nous tirerons d'abord du Lagrangien L les moments

canoniquement conjugués aux variables de configuration, soit :

$$G_\mu = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_\mu} \quad \beta^{(\lambda)} = \frac{\partial L}{\partial \dot{b}^{(\lambda)}}$$

Dans ces conditions, l'opérateur \mathcal{T}_μ engendre le vecteur constant :

$$G_\lambda \mathcal{T}_\mu x_\lambda = G_\lambda g_{\mu\lambda} = G_\mu$$

c'est-à-dire simplement le *vecteur impulsion*. D'autre part, l'opérateur $\mathcal{M}_{\mu\nu}$ engendre le tenseur antisymétrique constant :

$$M_{\mu\nu} = G_\lambda \mathcal{M}_{\mu\nu} x_\lambda + \beta^{(\lambda)} \mathcal{M}_{\mu\nu} b^{(\lambda)} = x_\mu G_\nu - x_\nu G_\mu + S_{\mu\nu}$$

C'est le *moment angulaire total* qui se compose de deux termes dont la signification physique est évidente : $x_\mu G_\nu - x_\nu G_\mu$ est le moment angulaire *orbital* relatif à l'origine. Le tenseur

$$S_{\mu\nu} = \beta^{(\lambda)} \mathcal{M}_{\mu\nu} b^{(\lambda)}$$

dont la forme dépend de la variance des $b^{(\lambda)}$ est le moment angulaire *propre* qui caractérise la rotation interne de la particule, et dont le rôle canonique a déjà été mis en évidence par deux d'entre nous [3].

Pour nous résumer, l'invariance du Lagrangien par rapport au groupe des glissements nous fournit deux relations fondamentales de conservation :

$$\dot{G}_\mu = 0 \quad (15)$$

$$\dot{M}_{\mu\nu} = 0.$$

Remarquons que si on explicite $M_{\mu\nu}$ dans la seconde équation, celle-ci devient :

$$\dot{S}_{\mu\nu} = G_\mu \dot{x}_\nu - G_\nu \dot{x}_\mu \quad (16)$$

en tenant compte de (15). Ainsi nous aboutissons au système (15), (16) où l'on reconnaît le système de Weyssenhoff [4].

D'autre part, on sait que l'algèbre de Lie du groupe inhomogène de Lorentz est construite sur les relations de commutation :

$$[\mathcal{T}_\mu, \mathcal{T}_\lambda] = 0$$

$$[\mathcal{M}_{\mu\nu}, \mathcal{T}_\alpha] = g_{\alpha\mu} \mathcal{T}_\nu - g_{\alpha\nu} \mathcal{T}_\mu$$

$$[\mathcal{M}_{\mu\nu}, \mathcal{M}_{\alpha\beta}] = g_{\mu\alpha} \mathcal{M}_{\nu\beta} + g_{\nu\beta} \mathcal{M}_{\mu\alpha} - g_{\mu\beta} \mathcal{M}_{\nu\alpha} - g_{\nu\alpha} \mathcal{M}_{\mu\beta}$$

A ces relations, vont correspondre des relations classiques exprimant les crochets de Poisson de nos constantes fondamentales, conformément au théorème général établi ci-dessus, soit :

$$[G_\mu, G_\nu] = 0$$

$$[M_{\mu\nu}, G_\alpha] = g_{\alpha\mu} G_\nu - g_{\alpha\nu} G_\mu$$

$$[M_{\mu\nu}, M_{\alpha\beta}] = g_{\mu\alpha} M_{\nu\beta} + g_{\nu\beta} M_{\mu\alpha} - g_{\mu\beta} M_{\nu\alpha} - g_{\nu\alpha} M_{\mu\beta}$$

(17)

Remarquons que le tenseur $M_{\mu\nu}$ n'est défini que

relativement à une origine arbitraire. Mais, comme l'écrit M. L. de Broglie [5] : « Dans chaque système de référence, l'origine des coordonnées est un point arbitraire, et le moment cinétique par rapport à ce point arbitraire n'a pas, en général, de signification physique particulière. Ce qui a une signification physique intéressante, c'est le moment cinétique par rapport à un centre doué de propriétés physiques. » Nous allons montrer, à partir des relations de conservation ci-dessus qu'un tel centre physique apparaît très naturellement en liaison avec l'étude générale du mouvement. Ce centre est lié à la particule et, par conséquent, est en mouvement, mais on verra que nous pouvons cependant le prendre comme origine pour évaluer le moment angulaire orbital.

Nous pouvons écrire la grandeur constante de l'impulsion sous la forme : $G_\mu G_\mu \equiv -M_0^2 c^2$, M_0 ayant les dimensions d'une masse. Si nous considérons alors le moment angulaire propre $S_{\mu\nu}$ et si

nous formons le vecteur : $R_\mu \equiv \frac{1}{M_0^2 c^2} S_{\mu\nu} G_\nu$, il aura les dimensions d'un rayon-vecteur dans l'espace-temps. Appliquons alors l'origine du vecteur $-R_\mu$ au centre x_μ de la particule. Son extrémité définira un point $Y_\mu \equiv x_\mu - R_\mu$. Ce point dont le rôle a été pressenti par Weyssenhoff [4] et qui a été mis en évidence par l'un de nous [6], nous pouvons l'appeler le « centre de gravité », il possède la particularité de se mouvoir d'un mouvement uniforme parallèlement au vecteur impulsion, comme c'est le cas pour le centre de gravité classique d'un système mécanique non relativiste en l'absence de champ extérieur. En effet, dérivons Y_μ par rapport au temps propre τ relatif au point x_μ :

$$\begin{aligned} \dot{Y}_\mu &= \dot{x}_\mu - \dot{R}_\mu = \dot{x}_\mu - \frac{1}{M_0^2 c^2} \dot{S}_{\mu\nu} G_\nu \\ &= \dot{x}_\mu - \frac{1}{M_0^2 c^2} (G_\mu \dot{x}_\nu - G_\nu \dot{x}_\mu) G_\nu \end{aligned}$$

ou encore, en posant $G_\mu \dot{x}_\mu = -\mathcal{M}_0 c^2$ (la quantité \mathcal{M}_0 , généralement variable, a encore les dimensions d'une masse), nous obtenons :

$$\dot{Y}_\mu = \frac{\mathcal{M}_0}{M_0^2} G_\mu.$$

Comme $\dot{G}_\mu = 0$, le mouvement est rectiligne. Sa vitesse unitaire constante Y'_μ est obtenue en faisant intervenir le temps propre θ relatif au point Y_μ :

$$\begin{aligned} Y'_\mu Y'_\mu &= -c^2 = \dot{Y}_\mu \dot{Y}_\mu (d\tau/d\theta)^2 \\ &= (\mathcal{M}_0^2/M_0^4) (-M_0^2 c^2) (d\tau/d\theta)^2 \end{aligned}$$

c'est-à-dire :

$$d\tau/d\theta = M_0/\mathcal{M}_0$$

et

$$Y'_\mu = \dot{Y}_\mu d\tau/d\theta = G_\mu/M_0 = \text{constante.}$$

Maintenant, nous pouvons exprimer le moment angulaire total relativement à ce centre de gravité, soit :

$$\mathcal{M}_{\mu\nu} \equiv R_\mu G_\nu - R_\nu G_\mu + S_{\mu\nu}.$$

Ce moment aura une signification physique intrinsèque indépendamment du choix de l'origine des axes, si bien qu'on aura avantage à l'introduire à la place de $M_{\mu\nu}$. D'autre part, il sera encore une constante du mouvement et ainsi vérifiera encore les relations de Lie données ci-dessus. En fait, il n'est rien d'autre que le moment angulaire relativement à une origine fixe, mais choisie sur la droite d'univers déterminée parcourue par le centre de gravité, si bien qu'à un instant t le vecteur Y_μ compté à partir de cette origine, est colinéaire à G_μ . Il s'ensuit qu'on peut ajouter au moment angulaire total $M_{\mu\nu} = x_\mu G_\nu - x_\nu G_\mu + S_{\mu\nu}$, le tenseur $Y_\nu G_\mu - Y_\mu G_\nu$ qui est nul. On obtient ainsi :

$$M_{\mu\nu} = (x_\mu - Y_\mu) G_\nu - (x_\nu - Y_\nu) G_\mu + S_{\mu\nu} = \mathcal{M}_{\mu\nu}.$$

Ainsi à toute particule régie par un Lagrangien invariant par glissement, et comportant des variables internes localisées en un point déterminé x_μ , nous sommes conduits à associer un autre point Y_μ en mouvement uniforme, autour duquel le point x_μ exécute un mouvement plus ou moins compliqué. Nous retrouvons les deux points « canoniquement conjugués » récemment mis en évidence par T. Takabayasi [7]. De plus, le mouvement de la particule nous fournit au point Y_μ un système déterminé de vecteurs que nous pouvons valablement choisir comme référentiel relativement fixe par rapport auquel on étudiera le mouvement du point x_μ et des « vecteurs internes ». En effet, considérons le vecteur G_μ et le tenseur $\mathcal{M}_{\mu\nu}$ comme localisés au point Y_μ . Nous aurons ainsi un premier axe colinéaire à G_μ et qui va glisser sur lui-même d'un mouvement uniforme. Puis nous obtiendrons un second axe orthogonal au précédent en considérant la « polarisation » [8] (aussi appelée « spin de Möller [6] »), à savoir :

$$\lambda_\mu = \frac{i}{2M_0 c} \varepsilon_{\mu\nu\alpha\beta} G_\nu \mathcal{M}_{\alpha\beta}$$

($\varepsilon_{\mu\nu\alpha\beta}$ est le tenseur complètement antisymétrique de Lévi-Civita). Ce vecteur, évidemment constant, va se déplacer parallèlement à lui-même. Finalement, nous choisirons, dans l'hyperplan orthogonal à G_μ , et λ_μ , qui reste parallèle à lui-même, deux autres axes perpendiculaires, qu'il est possible — et tout indiqué — de prendre encore de directions fixes, et qui seront alors définis dans cet hyperplan à une rotation constante arbitraire près (qui jouera le rôle de jauge). Ainsi nous définissons un « tétrapode » orthonormé formé de quatre vecteurs unitaires $\mathcal{A}_\mu^{(\xi)}$ (ξ est un indice non tensoriel prenant les valeurs 1, 2, 3, 4) dont le quatrième $\mathcal{A}_\mu^{(4)}$

est du genre temps. Ces vecteurs satisfont aux deux conditions équivalentes d'orthonormalité :

$$\mathcal{A}_\mu^{(\xi)} \mathcal{A}_\nu^{(\xi)} = g_{\mu\nu} \quad \mathcal{A}_\mu^{(\xi)} \mathcal{A}_\mu^{(\eta)} = g^{\xi\eta}.$$

Nous appellerons ce tétrapode le *système fixe*.

A cette étape, il apparaît que notre formalisme très général, qui paraissait initialement décrire une particule ponctuelle, engendre nécessairement un modèle « bilocal ». Il se rattache ainsi à de très nombreuses théories proposées récemment, qui considèrent d'emblée, soit deux points distincts [9], [10], soit tout un édifice, par exemple une gouttelette fluide [6], [11]. En particulier d'après cette dernière conception, le fluide est caractérisé localement par un vecteur conservatif « densité de matière » j_μ , et par un tenseur symétrique conservatif « densité d'énergie-impulsion » $t_{\mu\nu}$. L'impulsion globale G_μ est obtenue en intégrant sur une section quelconque d'espace Σ la composante $t_{\mu 4}$ du tenseur $t_{\mu\nu}$ relative au référentiel correspondant à Σ :

$$G_\mu = \frac{1}{ic} \int_\Sigma t_{\mu 4} dv.$$

C'est un vecteur constant. Le rôle du point x_μ considéré ici est alors joué par le barycentre X_μ relatif à la densité de matière j_4 dans une section d'espace particulière Σ_0 orthogonale à G_μ ; c'est le « centre de matière » :

$$X_\mu \int_{\Sigma_0} j_4 dv = \int_{\Sigma_0} x_\mu j_4 dv.$$

Le rôle du point Y_μ est joué par le barycentre relatif à la densité d'énergie t_{44} dans la même section d'espace Σ_0 ; c'est le « centre de gravité » :

$$Y_\mu \int_{\Sigma_0} t_{44} dv = \int_{\Sigma_0} x_\mu t_{44} dv.$$

On montre alors facilement que le moment angulaire relatif au point Y_μ calculé par intégration sur une section d'espace quelconque, soit :

$$\mathcal{M}_{\mu\nu} = \frac{1}{ic} \int_\Sigma [(x_\mu - Y_\mu) t_{\nu 4} - (x_\nu - Y_\nu) t_{\mu 4}] dv$$

est un tenseur constant, et que le moment angulaire relatif au centre de matière,

$$S_{\mu\nu} = \frac{1}{ic} \int_\Sigma [(x_\mu - X_\mu) t_{\nu 4} - (x_\nu - X_\nu) t_{\mu 4}] dv$$

est aussi un tenseur satisfaisant à la relation :

$$\dot{S}_{\mu\nu} = G_\mu \dot{X}_\nu - G_\nu \dot{X}_\mu.$$

Ainsi tout le formalisme de la gouttelette est entièrement identique à celui que nous présentons ici. On arriverait à la même conclusion pour la théorie développée il y a longtemps par Matthiessen et ses élèves [12], [13] qui étudient à différents degrés d'approximation l'évolution d'une particule considérée comme une singularité du champ de gravitation régi par les équations d'Einstein.

Il nous paraît digne de remarque que le forma-

lisme très général proposé ici, qui à l'origine ne semblait pas attribuer à la particule une extension dans l'espace, nous a conduit à un modèle bilocal qui concorde exactement avec les résultats obtenus par la démarche opposée, à savoir en schématisant des structures étendues dans l'espace. Cette remarque peut être considérée comme un argument en faveur de l'opinion générale suivant laquelle le fait d'attribuer à une particule soi-disant ponctuelle d'autres propriétés qu'une pure et simple impulsion — par exemple, de la doter d'un « spin » — revient en réalité à lui reconnaître implicitement une certaine extension dans l'espace. Selon cette conception, on serait toujours, en fait, en présence d'une structure étendue dans l'espace, schématisée par différents modèles correspondant à des approximations différentes. Ainsi la première approximation représenterait l'ensemble de la particule par un point doté d'une impulsion, celle-ci étant nécessairement colinéaire à la vitesse. Le formalisme général développé ci-dessus montre alors immédiatement que le moment angulaire total se réduit à sa partie orbitale sans moment angulaire propre. Le rayon-vecteur R_μ s'annule, si bien que les points x_μ et Y_μ coïncident ; le modèle devient unilocal et le choix de l'origine sur la droite d'univers décrite par la particule annule le moment angulaire total $\mathcal{M}_{\mu\nu}$. Le point comportant en outre des variables internes tel que nous l'avons étudié ci-dessus, représenterait alors une seconde approximation qui se traduit par le modèle bilocal.

Il semble aussi que cette remarque puisse être le point de départ d'un examen critique de la conception de la particule à spin telle qu'elle est utilisée par la mécanique quantique : cette particule est considérée comme rigoureusement ponctuelle, ce qui se traduit par l'apparition de la fonction δ de Dirac dans le formalisme, et en même temps elle est dotée de spin et d'autres propriétés spécifiques — par exemple, de moment magnéto électrique — qui du point de vue classique sont en fait des « variables internes ». Mais, d'autre part, une telle particule quantique est à la fois strictement ponctuelle et sans localisation précise, étant donné les relations d'incertitude. Peut-être est-il permis, au contraire, de rechercher un modèle « déterministe » qui pourrait être à la fois strictement localisé et non ponctuel, ou, pour parler plus précisément « multi-ponctuel ».

III. Le tétrapode fondamental. — Après ces considérations générales, nous allons préciser notre modèle pour retrouver les représentations physiques ordinaires de la particule tournante relativiste. Ainsi nous devons introduire nos variables internes de telle façon qu'elles puissent décrire convenablement une rotation relativiste, c'est pourquoi nous allons généraliser de façon naturelle la représentation de la toupie non-relativiste.

On sait que celle-ci est représentée par un trièdre mobile de vecteurs orthonormés $b_k^{(r)}$, qui nous permet de définir un tenseur antisymétrique « rotation instantanée » $\omega_{ij} = \dot{b}_i^{(r)} b_j^{(r)}$ (le point représente la dérivée par rapport au temps et les indices r, i, j prennent les valeurs 1, 2, 3). Outre son caractère orthonormé, le trièdre doit être orienté par le choix d'un certain *sens de rotation*. Si on se donne deux des vecteurs et l'orientation, le troisième vecteur est complètement déterminé par la relation :

$$b_i^{(r)} = \varepsilon_{ijk} \varepsilon^{rst} b_j^{(s)} b_k^{(t)}$$

(ε_{ijk} et ε^{rst} sont les symboles complètement antisymétriques du troisième ordre de Lévi-Civita). Cette relation entraîne l'orthonormalité qu'on peut exprimer par les relations équivalentes :

$$b_i^{(r)} b_j^{(r)} = g_{ij} \quad b_i^{(r)} b_i^{(s)} = g^{rs}.$$

De plus, chaque vecteur est déterminé sans ambiguïté à partir des deux autres, dès lors qu'on a choisi des permutations positives pour i, j, k et pour r, s, t , soit, par exemple $i, j, k = r, s, t = 1, 2, 3$. Remarquons que ε_{ijk} est un pseudo-tenseur complètement antisymétrique, tandis que les ε^{rst} sont des quantités égales à $+1$ ou -1 et évidemment invariantes sous une rotation « propre », c'est-à-dire ne comportant pas d'inversion d'espace. Mais nous avons besoin d'une convention supplémentaire si nous désirons attribuer une variance aux ε^{rst} sous une inversion d'espace, et cette convention déterminera en même temps la variance des vecteurs formant le trièdre. Si les ε^{rst} sont invariants sous une inversion d'espace, alors, comme le produit $b_j^{(s)} b_k^{(t)}$ est évidemment invariant, tandis que le pseudotenseur ε_{ijk} change de signe, les composantes $b_i^{(r)}$ sur les axes inversés deviennent $-b_i^{(r)}$. En d'autres termes, les $b^{(r)}$ sont de « vrais » vecteurs (vecteurs polaires). Au contraire, si nous supposons que les ε^{rst} sont des pseudoscalaires qui changent de signe sous une inversion d'espace, alors les $b_i^{(r)}$ garderont le même signe sur les axes inversés et le trièdre ainsi défini sera formé de pseudovecteurs (vecteurs axiaux).

La généralisation relativiste nous conduit de même à considérer un trièdre de quadrivecteurs contenus dans l'espace propre de la particule et à le compléter par un quatrième quadrivecteur du genre temps colinéaire à sa vitesse unitaire x_μ (dorénavant le point représente la dérivation par rapport au temps propre τ de la particule). Pour exprimer l'orthonormalité et l'orientation d'un tel « tétrapode », nous devons écrire deux conditions :

$$b_\mu^{(r)} b_\mu^{(s)} = g^{rs} \quad (18)$$

$$\dot{x}_\mu = \frac{ic}{6} \varepsilon_{\mu\nu\alpha\beta} \varepsilon^{rst} b_\nu^{(r)} b_\alpha^{(s)} b_\beta^{(t)}. \quad (19)$$

De ces relations résultent, d'une part, les deux

relations équivalentes d'orthonormalité relativiste :

$$b_\mu^{(\xi)} b_\nu^{(\eta)} = g_{\mu\nu} \quad b_\mu^{(\xi)} b_\mu^{(\eta)} = g^{\xi\eta} \quad (20)$$

(cette fois, les indices grecs ξ, η désignant les vecteurs, prennent, comme les indices tensoriels μ, ν , les valeurs 1, 2, 3, 4, $b_\mu^{(4)}$ représentant \dot{x}_μ/ic , alors que les indices latins r, s, t , prenant les valeurs 1, 2, 3, désignent spécialement les trois vecteurs du genre espace) ; d'autre part, une orientation déterminée du trièdre du genre espace et du vecteur du genre temps, ces orientations étant fixées sans ambiguïté par le choix d'une permutation positive des $\mu\nu\alpha\beta$ (par exemple $\mu, \nu, \alpha, \beta = 1, 2, 3, 4$) et des r, s, t ; (par exemple, $r, s, t = 1, 2, 3$). Comme dans le cas précédent, les ε^{rst} sont invariants sous le groupe connexe de Lorentz (transformations orthochrones propres). Mais nous devons fixer conventionnellement leur variance sous un renversement du temps (transformation antichrone T) et sous une inversion de l'espace (transformation impropre ou parité P). Il y a ainsi quatre conventions possibles qui définiront quatre types différents de variance pour le tétrapode et qui correspondant naturellement à quatre cas physiques différents :

1° ε^{rst} est un « vrai » scalaire, il est invariant aussi bien sous T que sous P : on a un tétrapode « propre » ;

2° ε^{rst} change de signe sous T et est invariant sous P . On a un tétrapode « antichrone » ;

3° ε^{rst} change de signe sous P et est invariant sous T . On a un tétrapode « impropre » ;

4° ε^{rst} change de signe aussi bien sous P que sous T . On a un tétrapode « invariant de charge » (parce qu'il est invariant sous PT qui est la conjugaison de charge). Naturellement, dans chacun de ces cas, la forme du Lagrangien doit être choisie de façon qu'il soit invariant sous une transformation de groupe complet de Lorentz, compte tenu des transformations subies par les tétrapodes du type considéré.

Ceci étant dit, et la possibilité des différentes variances étant réservée par l'éventualité de conventions correspondantes sur les Σ^{rst} , disons tout de suite que nous laisserons de côté, dans cet article, l'étude des transformations par inversion, problème très important que nous nous proposons d'aborder dans un travail ultérieur. Dans tout ce qui suit, nous allons donc restreindre les glissements aux transformations orthochrones propres de Lorentz. La rotation instantanée relativiste du tétrapode s'exprime évidemment par le tenseur $\omega_{\mu\nu} = \dot{b}_\mu^{(\xi)} b_\nu^{(\eta)}$ avec sommation sur ξ . Ce tenseur généralise de façon naturelle le tenseur non-relativiste de rotation instantanée : relativement au système propre, nous devons ajouter aux composantes d'espace : $\omega_{ij} = \dot{b}_i^{(r)} b_j^{(r)}$ les composantes de temps $\omega_{k4} = \dot{b}_k^{(4)} b_4^{(4)} = \dot{b}_k^{(4)}$ qui représentent l'accélération conformément aux conceptions relativistes. Ainsi

l'évolution dans le temps de notre tétrapode fondamental représente en même temps la rotation et l'accélération du point matériel considéré, ces deux grandeurs étant unies en un tout indissociable dans tout référentiel autre que le système propre.

Comme nous l'avons dit plus haut, ce modèle ponctuel doit être nécessairement complété par un centre de gravité auquel est lié un autre tétrapode qui se déplace parallèlement à lui-même avec une vitesse constante. En effet, une fois qu'on a choisi un Lagrangien déterminant l'évolution des $b_\mu^{(\xi)}$, nous pouvons en tirer l'impulsion $G_\mu = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_\mu}$ et le moment angulaire propre

$$S_{\mu\nu} = b_\mu^{(\xi)} \frac{\partial L}{\partial \dot{b}_\nu^{(\xi)}} - b_\nu^{(\xi)} \frac{\partial L}{\partial \dot{b}_\mu^{(\xi)}}$$

d'où le rayon-vecteur

$$R_\mu = - \frac{1}{G_\lambda G_\lambda} S_{\mu\nu} G_\nu$$

qui nous fournit le contre de gravité $Y_\mu = x_\mu - R_\mu$. De plus, le moment angulaire total (relativement au centre de gravité) est

$$\mathcal{M}_{\mu\nu} = R_\mu G_\nu - R_\nu G_\mu + S_{\mu\nu}.$$

On peut alors définir les deux premiers vecteurs du système « fixe » :

$$c_\mu^{(4)} = G_\mu \sqrt{-G_\lambda G_\lambda} \quad c_\mu^{(3)} = \lambda_\mu \sqrt{\lambda_\nu \lambda_\nu}$$

avec

$$\lambda_\mu = \frac{1}{2} \varepsilon_{\mu\nu\alpha\beta} a_\nu^{(4)} \mathcal{M}_{\alpha\beta}.$$

Enfin les deux derniers sont déterminés, à une jauge constante arbitraire près, par les équations :

$$a_\mu^{(1)} = a_\mu^{(2)} = 0. \quad a_\mu^{(4)} = \frac{1}{6} \varepsilon_{\mu\nu\alpha\beta} \varepsilon^{rst} a_\nu^{(r)} c_\alpha^{(s)} a_\beta^{(t)}$$

$$c_\mu^{(3)} a_\mu^{(4)} = g^{st}.$$

Ainsi nous aboutissons à un édifice formé de deux tétrapodes orthonormés localisés en deux points différents, liés l'un à l'autre. Cet édifice bilocal, décrit en premier lieu par Takabayasi et ses collaborateurs [7], [20], et qu'on conviendra d'appeler un *rotateur relativiste* représente par un schéma unique, d'une part, les modèles présentés explicitement comme bilocaux [9], [10], d'autre part, les modèles pseudo-ponctuels tels que, par exemple, la particule à spin ordinaire, et aussi les modèles de particules étendues convenablement schématisés [11]. Mais nous pensons que cette représentation par deux tétrapodes est la plus suggestive et aussi la plus maniable. Cette remarque permet de donner un très vaste champ de validité à la théorie récemment proposée par deux d'entre nous [14] qui décrit la dynamique d'un tel rotateur par le mouvement « global » ou « externe » du centre de

gravité, et par le mouvement « interne » consistant dans l'évolution du vecteur R_μ et de l'orientation relative du tétrapode « mobile » par rapport au tétrapode « fixe », cette orientation étant exprimée au moyen de la généralisation relativiste des angles d'Euler [15], ce qui permet de former des opérateurs de rotation susceptibles d'être quantifiés [16].

Nous pouvons immédiatement appliquer ces considérations sur le tétrapode fondamental au cas très simple du « Lagrangien linéaire » introduit par Takabayasi et deux d'entre nous et qu'on a fréquemment utilisé par la suite [17], [18], [19], [2]. Un premier terme représentant l'énergie cinétique de rotation propre est formé de la façon suivante : plaçons-nous dans le cas dit de Frenkel [21] où le moment angulaire propre de la particule est un tenseur d'espace propre :

$$S_{\mu\nu} \dot{x}_\nu = 0.$$

Alors, si nous formons le spin

$$s_\mu = \frac{i}{2c} \varepsilon_{\mu\nu\alpha\beta} \dot{x}_\nu S_{\alpha\beta},$$

la relation précédente entraîne la possibilité d'exprimer $S_{\mu\nu}$ entièrement en fonction de \dot{x}_μ et s_μ [6]

$$S_{\mu\nu} = \frac{i}{c} \varepsilon_{\mu\nu\alpha\beta} \dot{x}_\alpha s_\beta.$$

Prenant alors le vecteur $b_\mu^{(4)}$ sur \dot{x}_μ et le vecteur $b_\mu^{(3)}$ sur s_μ :

$$\dot{x}_\mu = i c l_\mu^{(4)} \quad s_\mu = s_0 l_\mu^{(3)}$$

(s_0 est le module du spin), nous obtenons :

$$S_{\mu\nu} = s_0 \varepsilon_{\mu\nu\alpha\beta} b_\alpha^{(3)} l_\beta^{(4)}$$

c'est-à-dire, d'après (18) et (19) :

$$S_{\mu\nu} = s_0 (l_\mu^{(1)} l_\nu^{(2)} - l_\nu^{(1)} l_\mu^{(2)}).$$

L'énergie cinétique peut alors être formée au moyen de l'expression classique :

$$T = \frac{1}{2} S_{\mu\nu} \omega_{\mu\nu} = \frac{1}{2} s_0 (l_\mu^{(1)} l_\nu^{(2)} - l_\nu^{(1)} l_\mu^{(2)}) b_\mu^{(\xi)} l_\nu^{(\xi)}$$

$$= s_0 (b_\mu^{(1)} b_\mu^{(2)} - b_\mu^{(1)} b_\mu^{(2)}) = s_0 b_\mu^{(1)} b_\mu^{(2)}.$$

Les autres termes s'annulent d'après les conditions d'orthonormalité (20). En complétant ce terme par les conditions de Lagrange discutées dans cette section, le Lagrangien devient :

$$L = s_0 b_\mu^{(1)} l_\mu^{(2)} + \lambda^{rs} (l_\mu^{(r)} l_\mu^{(s)} - g^{rs})$$

$$+ \lambda_\mu \left(\dot{x}_\mu - \frac{ic}{6} \varepsilon_{\mu\nu\alpha\beta} \varepsilon^{rst} l_\nu^{(r)} l_\alpha^{(s)} l_\beta^{(t)} \right)$$

λ_μ et λ^{rs} étant des multiplicateurs de Lagrange (λ^{rs} est évidemment symétrique en r et s).

Un tel Lagrangien est invariant sous un glissement général (transformation inhomogène de Lorentz). De plus, il est également invariant sous une rotation de $b_\mu^{(1)}$ et $b_\mu^{(2)}$ autour du plan $b_\mu^{(3)}$, $b_\mu^{(4)}$, si bien que le groupe d'invariance est le produit direct du groupe inhomogène de Lorentz et du groupe des rotations planes orthogonales à $b_\mu^{(3)}$, $b_\mu^{(4)}$.

Les générateurs infinitésimaux seront :

— l'opérateur \mathcal{T}_μ des translations infinitésimales agissant sur x_μ ;

— l'opérateur $\mathcal{M}_{\mu\nu}$ des rotations infinitésimales dans l'espace-temps, agissant sur x_μ et sur les $b_\mu^{(r)}$;

— l'opérateur \mathcal{A} des rotations planes infinitésimales orthogonales à $b_\mu^{(3)}$, $b_\mu^{(4)}$ agissant sur $b_\mu^{(1)}$ et $b_\mu^{(2)}$.

Pour exprimer les constantes du mouvement correspondantes, constituons d'abord le formalisme canonique. Les seules variables dont les dérivées figurent dans le Lagrangien sont x_μ et $b_\mu^{(1)}$. Il faut donc introduire deux moments conjugués :

$$G_\mu \equiv \partial L / \partial \dot{x}_\mu = \lambda_\mu \quad \mathcal{P}_\mu^{(1)} \equiv \partial L / \partial \dot{b}_\mu^{(1)} = s_0 b_\mu^{(2)}.$$

Remarquons que, comme le moment conjugué de $b_\mu^{(1)}$ n'est autre que $b_\mu^{(2)}$ il est possible de former un Hamiltonien, quoique le Lagrangien soit linéaire en $b_\mu^{(1)}$. On obtient :

$$H = -\lambda^{rs} (b_\mu^{(r)} b_\mu^{(s)} - g^{rs}) + \frac{ic}{6} G_\mu \varepsilon_{\mu\nu\alpha\beta} \varepsilon^{rst} b_\nu^{(r)} l_\alpha^{(s)} b_\beta^{(t)}.$$

Ceci étant une expression abrégée dans laquelle $b_\mu^{(2)}$ doit être remplacé chaque fois qu'il apparaît par $b_\mu^{(1)} / s_0$. Un cas analogue a été étudié par l'un de nous [19].

Le vecteur constant correspondant à l'opérateur \mathcal{T}_μ est l'impulsion G_μ , comme on l'a vu plus haut. L'opérateur $\mathcal{M}_{\mu\nu}$ agit sur un vecteur quelconque q_λ suivant :

$$\mathcal{M}_{\mu\nu} q_\lambda = q_\mu g_{\nu\lambda} - q_\nu g_{\mu\lambda}.$$

Le tenseur constant correspondant est donc :

$$\begin{aligned} M_{\mu\nu} &= G_\lambda \mathcal{M}_{\mu\nu} x_\lambda + \mathcal{P}_\lambda^{(1)} \mathcal{M}_{\mu\nu} b_\lambda^{(1)} \\ &= G_\nu x_\mu - G_\mu x_\nu + s_0 (l_\nu^{(2)} l_\mu^{(1)} - l_\mu^{(2)} l_\nu^{(1)}). \end{aligned}$$

Le dernier terme est donc simplement le moment angulaire propre qui avait été utilisé initialement pour former le Lagrangien. Ainsi $M_{\mu\nu}$ est, comme il se doit, le moment angulaire total utilisé dans la représentation physique, soit la somme des mouvements angulaires orbital et propre.

Enfin, l'opérateur \mathcal{A} agit sur $b_\mu^{(r)}$ d'après $\mathcal{A} b_\mu^{(r)} = \sum_{(1,2)} \varepsilon_{\mu}^{rs} b_\mu^{(1)}$, $\sum_{(1,2)}$ étant la matrice des rotations infinitésimales dans le plan $b^{(1)}$, $b^{(2)}$

$$\Sigma_{(1,2)} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Le scalaire constant qui lui correspond est :

$$\mathcal{P}_\mu^{(1)} \mathcal{A} b_\mu^{(1)} = \mathcal{P}_\mu^{(1)} l_\mu^{(2)} = s_0 b_\mu^{(2)} b_\mu^{(2)} = s_0.$$

C'est simplement le module du spin.

Les relations de conservation sont donc :

$$\dot{G}_\mu = 0 \quad \dot{M}_{\mu\nu} = 0 \quad \dot{s}_0 = 0.$$

Nous pouvons aussi écrire les relations de Lie en crochets de Poisson :

$$[G_\mu, G_\nu] = 0$$

$$[M_{\mu\nu}, G_\alpha] = g_{\alpha\mu} G_\nu - g_{\alpha\nu} G_\mu$$

$$[M_{\mu\nu}, M_{\alpha\beta}] = g_{\mu\alpha} M_{\nu\beta} + g_{\mu\beta} M_{\nu\alpha} - g_{\mu\gamma} M_{\nu\alpha} - g_{\nu\gamma} M_{\mu\beta}.$$

Comme l'opérateur \mathcal{A} commute avec \mathcal{T}_μ et $\mathcal{M}_{\mu\nu}$, les crochets de Poisson de s_0 avec G_μ et $M_{\mu\nu}$ sont nuls. Toutes ces relations de commutation se vérifient immédiatement à partir des expressions canoniques :

$$\begin{aligned} G_\mu &= G_\mu, M_{\mu\nu} = x_\mu G_\nu - x_\nu G_\mu + \mathcal{P}_\mu^{(1)} b_\nu^{(1)} - \mathcal{P}_\nu^{(1)} b_\mu^{(1)}, \\ s_0 &= \mathcal{P}_\mu^{(1)} b_\mu^{(2)}. \end{aligned}$$

IV. Le rotateur quadratique. — Nous allons maintenant appliquer notre théorie à un autre Lagrangien, proposé initialement par Nakano [22] et dont la forme quadratique permet des développements plus intéressants [23], [14].

L'expression de la rotation instantanée

$$\omega_{\mu\nu} = \dot{b}_\mu^{(\xi)} b_\nu^{(\xi)}$$

sert encore de point de départ, et on généralise l'expression classique de l'énergie cinétique de rotation physique élémentaire $T = \frac{1}{2} I \omega^2$ (la constante I est le moment d'inertie). La généralisation relativiste fournit :

$$T = \frac{1}{4} I_{[\alpha\beta][\mu\nu]} \omega_{\alpha\beta} \omega_{\mu\nu},$$

le tenseur d'inertie constant $I_{[\alpha\beta][\mu\nu]}$ étant symétrique relativement aux couples $\alpha\beta$ et $\mu\nu$ et antisymétrique à la fois en α, β et en μ, ν . Une restriction intéressante consiste à supposer que la particule possède une structure de symétrie *hyper-sphérique* dans l'espace-temps, ce qui donne au tenseur d'inertie la forme

$$I_{\alpha\beta\mu\nu} = \frac{1}{2} I (g_{\alpha\mu} g_{\beta\nu} - g_{\alpha\nu} g_{\beta\mu})$$

avec une seule constante I . On obtient donc :

$$T = \frac{1}{4} I \omega_{\mu\nu} \omega_{\mu\nu} = \frac{1}{4} I \dot{b}_\mu^{(\xi)} b_\nu^{(\xi)} \dot{b}_\mu^{(\eta)} b_\nu^{(\eta)}$$

ou, en tenant compte des relations d'orthonormalité :

$$T = \frac{1}{4} I \dot{b}_\mu^{(\xi)} \dot{b}_\mu^{(\xi)}$$

(ces conditions seront naturellement introduites par la suite par des conditions de Lagrange convenables).

Une particularité de ce Lagrangien est la présence d'un terme en $\dot{b}_\mu^{(4)}$, c'est-à-dire contenant \ddot{x}_μ . Nous avons ainsi à faire appel à un formalisme canonique élargi au cas où il apparaît des dérivées secondes, formalisme proposé par Ostrogradski [24] [25]. La démonstration est analogue à celle donnée à la section I. Soit :

$$L \equiv f(\tau, Q, \dot{Q}, \ddot{Q})$$

une fonction des variables Q et de leurs premières et secondes dérivées. On pose

$$y \equiv \dot{Q} \quad z \equiv \ddot{Q}$$

et on étudie l'intégrale d'action :

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_0^1 &\equiv \int_{\tau_0}^{\tau_1} [f(\tau, Q, y, z) + P(\dot{Q} - y) + \Pi(\ddot{Q} - z)] d\tau \\ &= [PQ]_{\tau_0}^{\tau_1} + [\Pi\dot{Q}]_{\tau_0}^{\tau_1} \\ &\quad + \int_{\tau_0}^{\tau_1} [f(\tau, Q, y, z) - \dot{P}Q - Py - \dot{\Pi}\dot{Q} - \Pi z] d\tau \end{aligned}$$

P et Π étant des lignes $P_{(\lambda)}$ $\Pi_{(\lambda)}$ à valeurs dans le dual de R^n . Si δQ est une variation quelconque de la fonction Q , et $\delta\dot{Q}$ une variation quelconque de la fonction \dot{Q} , la variation correspondante de \mathcal{A}_0^1 est :

$$\begin{aligned} \delta \mathcal{A}_0^1 &= [P \cdot \delta Q]_{\tau_0}^{\tau_1} + [\Pi \cdot \delta\dot{Q}]_{\tau_0}^{\tau_1} \\ &\quad + \int_{\tau_0}^{\tau_1} \left[\left(\frac{\partial L}{\partial Q} - \dot{P} \right) \cdot \delta Q \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{\partial L}{\partial y} - P - \dot{\Pi} \right) \cdot \delta y + \left(\frac{\partial L}{\partial z} - \Pi \right) \cdot \delta z \right] d\tau \end{aligned}$$

en tenant compte de l'hypothèse

$$y \equiv \dot{Q}, \quad d'où : \quad \delta y \equiv \delta\dot{Q}.$$

La condition nécessaire et suffisante pour que :

$$[\delta Q]_{\tau_0} = \delta Q(\tau_1) = 0, \quad \delta\dot{Q}(\tau_0), \quad \delta\dot{Q}(\tau_1) = 0 \Rightarrow [\delta \mathcal{A}_0^1] = 0$$

est fournie par les équations de Lagrange généralisées :

$$\partial L / \partial Q = \dot{P} \quad \partial L / \partial y = P = \dot{\Pi} \quad \partial L / \partial z = \Pi.$$

Si ces équations sont vérifiées, toute variation $\delta_i Q$, $\delta_i \dot{Q}$, fonction de τ et de Q , qui laisse le Lagrangien invariant (transformation infinitésimale du groupe d'invariance) donnera :

$$\delta_i \mathcal{A}_0^1 = 0 = [P \cdot \delta_i Q]_{\tau_0}^{\tau_1} + [\Pi \cdot \delta_i \dot{Q}]_{\tau_0}^{\tau_1}$$

c'est-à-dire, puisque τ_0 et τ_1 sont arbitraires :

$$u_i \equiv P \cdot \delta_i Q + \Pi \cdot \delta_i \dot{Q} = \text{constante.}$$

Ainsi, nous pouvons étendre à ce cas le théorème de Noether en considérant un espace de configuration construit sur les variables $q^\alpha \equiv (Q^{(\lambda)}, \dot{Q}^{(\lambda)})$,

avec les moments conjugués généralisés

$$p_\alpha \equiv (P_{(\lambda)}, \Pi_{(\lambda)}) : \Pi_{(\lambda)} \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{Q}^{(\lambda)}} \quad P_{(\lambda)} \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{Q}^{(\lambda)}} - \dot{\Pi}_{(\lambda)} :$$

Pour tout groupe de Lie G laissant le Lagrangien invariant, agissant dans cet espace de configuration, sans changer τ , chaque transformation infinitésimale δ_i de G engendre une constante du mouvement

$$u_i = p \cdot \delta_i q.$$

Maintenant, nous pouvons comme ci-dessus, considérer la phase $\left(\frac{p}{q}\right)$ et les variables dynamiques u , fonctions de la phase et de τ . Nous pouvons attacher à chacune d'elles une différentielle d_u :

$$d_u(t) = 0 \quad d_u(q^\alpha) = \frac{\partial u}{\partial p_\alpha} \quad d_u(p_\alpha) = -\frac{\partial u}{\partial q^\alpha}$$

et de même définir le crochet de Poisson de deux variables dynamiques

$$[u, v] = d_u(v) = \frac{\partial u}{\partial p_\alpha} \frac{\partial v}{\partial q^\alpha} - \frac{\partial u}{\partial q^\alpha} \frac{\partial v}{\partial p_\alpha}$$

autrement dit :

$$\begin{aligned} [u, v] &= \frac{\partial u}{\partial P_{(\lambda)}} \frac{\partial v}{\partial Q^{(\lambda)}} + \frac{\partial u}{\partial \Pi_{(\lambda)}} \frac{\partial v}{\partial \dot{Q}^{(\lambda)}} \\ &\quad - \frac{\partial u}{\partial Q^{(\lambda)}} \frac{\partial v}{\partial P_{(\lambda)}} - \frac{\partial u}{\partial \dot{Q}^{(\lambda)}} \frac{\partial v}{\partial \Pi_{(\lambda)}}. \end{aligned}$$

De ces formules généralisées, nous pouvons tirer sans difficulté le théorème suivant : Si les générateurs infinitésimaux δ_i du groupe d'invariance satisfont aux relations de Lie :

$$\delta_j \delta_k - \delta_k \delta_j = T_{jk}^l \delta_l,$$

les crochets de Poisson des constantes fondamentales du mouvement qui leur correspondent obéissent à la relation de même forme :

$$[u_j, u_k] = T_{jk}^l u_l.$$

Dans notre Lagrangien quadratique, la seule dérivée seconde qui figure est \ddot{x}_μ . Il faut donc considérer d'un côté les vecteurs du genre espace $b_\mu^{(r)}$ avec les moments conjugués usuels $\beta_\mu^{(r)} \equiv \frac{\partial L}{\partial b_\mu^{(r)}}$, et de l'autre le vecteur du genre temps $b_\mu^{(4)}$ qu'on écrira $b_\mu^{(4)} \equiv \frac{\dot{x}_\mu}{ic}$, en prenant les conditions d'orthonormalité sous la forme (18), (19). Il faut alors considérer la variable x_μ (qui ne figure pas explicitement) et son moment conjugué qui prend la forme particulière

$$G_\mu = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_\mu} - \frac{d}{d\tau} \frac{\partial L}{\partial \ddot{x}_\mu}$$

et de plus la variable \dot{x}_μ considérée comme indépendante, et qui a pour moment conjugué $N_\mu = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_\mu}$. En tenant compte de cette variable supplémentaire, la constante du mouvement associée à chaque transformation infinitésimale δ_i de groupe d'invariance s'écrit :

$$u_i = G_\mu \delta_i x_\mu + N_\mu \delta_i \dot{x}_\mu + \beta_\mu^{(r)} \delta_i b_\mu^{(r)}.$$

En particulier les générateurs infinitésimaux du groupe inhomogène de Lorentz engendreront les constantes :

$$G_\mu = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_\mu} - \frac{d}{d\tau} \frac{\partial L}{\partial \ddot{x}_\mu}$$

$$M_{\mu\nu} = x_\mu G_\nu - x_\nu G_\mu + \dot{x}_\mu \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_\nu} - \dot{x}_\nu \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_\mu} + b_\mu^{(r)} \frac{\partial L}{\partial b_\nu^{(r)}} - b_\nu^{(r)} \frac{\partial L}{\partial b_\mu^{(r)}}$$

et le moment angulaire propre prendra la forme

$$S_{\mu\nu} = \dot{x}_\mu \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_\nu} - \dot{x}_\nu \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_\mu} + b_\mu^{(r)} \frac{\partial L}{\partial b_\nu^{(r)}} - b_\nu^{(r)} \frac{\partial L}{\partial b_\mu^{(r)}}$$

déjà obtenue par deux d'entre nous [3].

Le moment angulaire total par rapport au centre de gravité sera :

$$\mathcal{M}_{\mu\nu} = R_\mu G_\nu - R_\nu G_\mu + S_{\mu\nu}$$

et les crochets de Poisson de G_μ et $\mathcal{M}_{\mu\nu}$ exprimés au moyen des variables canoniques, x_μ , G_μ , \dot{x}_μ , N_μ , $b_\mu^{(r)}$, $\beta_\mu^{(r)}$ obéiront aux relations de Lie [17].

Nous appliquerons la théorie prise sous cette forme au Lagrangien [26].

$$L = -\frac{1}{4} I \left(b_\mu^{(r)} b_\mu^{(r)} - \frac{1}{c^2} \dot{x}_\mu \dot{x}_\mu \right) + \lambda^{rs} (b_\mu^{(r)} l_\mu^{(s)} - g^{rs})$$

$$+ \lambda_\mu \left(\dot{x}_\mu - \frac{ic}{6} \varepsilon_{\mu\nu\alpha\beta} \varepsilon^{rst} b_\nu^{(r)} l_\alpha^{(s)} b_\beta^{(t)} \right).$$

Les moments canoniques sont :

$$N_\mu = \frac{1}{2c^2} I \dot{x}_\mu \quad G_\mu = \lambda_\mu - \frac{1}{2c^2} I \ddot{x}_\mu \quad \beta_\mu^{(r)} = -\frac{1}{2} I b_\mu^{(r)}.$$

On forme facilement $S_{\mu\nu}$:

$$S_{\mu\nu} = I \left(b_\mu^{(r)} b_\nu^{(r)} - \frac{1}{c^2} \dot{x}_\mu \dot{x}_\nu \right) = I b_\mu^{(\xi)} b_\nu^{(\xi)} = I \omega_{\mu\nu}.$$

Ce n'est pas autre chose que l'expression homologue au moment cinétique classique $S = I\omega$, qui correspond à l'expression $T = \left(\frac{1}{2}\right) I\omega^2$ pour l'énergie cinétique que nous avons prise pour point de départ.

Le Lagrangien proposé montre deux particularités intéressantes : d'une part, le moment angulaire propre n'est pas contenu dans l'espace propre,

contrairement à ce qui était posé par hypothèse pour le Lagrangien linéaire de la section précédente. Le produit contracté $S_{\mu\nu} \dot{x}_\nu$ — que nous avons appelé le « balourd » [6] — devient :

$$I b_\mu^{(\xi)} b_\nu^{(\xi)} \cdot ic b_\nu^{(4)} = I b_\mu^{(4)} \cdot ic$$

d'où :

$$S_{\mu\nu} \dot{x}_\nu = I \ddot{x}_\mu.$$

Le balourd est colinéaire à l'accélération d'univers. Cette relation qui remplace, dans le cas considéré, la condition de Frenkel $S_{\mu\nu} \dot{x}_\nu = 0$ du cas précédent, forme avec les relations de conservation du système de treize équations sur treize variables indépendantes, qui déterminent entièrement le mouvement (aux conditions initiales près). L'un d'entre nous [27] a intégré ce système dans le cas de conditions initiales assez particulières.

D'autre part, L se trouve être invariant par une permutation circulaire des trois vecteurs du genre espace $b_\mu^{(r)}$. Autrement dit, le groupe de jauge est, cette fois, le *groupe des rotations tridimensionnelles*. On a donc à introduire les générateurs infinitésimaux du groupe des rotations agissant sur les indices supérieurs, soit :

$$\mathcal{M}^{ij} b_\mu^{(k)} - g^{kj} b_\mu^{(i)} - g^{ki} b_\mu^{(j)}$$

ce qui nous fournit les constantes du mouvement :

$$\omega^{ij} = \varepsilon_\mu^{(k)} \mathcal{M}^{ij} b_\mu^{(k)} = \varepsilon_\mu^{(i)} b_\mu^{(j)} - \varepsilon_\mu^{(j)} b_\mu^{(i)}.$$

Nous obtenons ainsi trois scalaires constants dans le temps qu'on peut écrire :

$$\sigma^k = \frac{1}{2} \varepsilon^{ijk} \omega^{ij} = \varepsilon^{ijk} \varepsilon_\mu^{(i)} b_\mu^{(j)} = -\frac{1}{2} I \varepsilon^{ijk} b_\mu^{(i)} l_\mu^{(j)} \quad (22)$$

avec $\delta^k = 0$. On sait que l'opérateur de spin qu'on peut écrire $S^k = \frac{1}{2} \varepsilon^{ijk} \mathcal{M}^{ij}$ obéit aux relations de commutation du groupe des rotations tridimensionnelles :

$$[S^i, S^j] = \varepsilon^{ijk} S^k. \quad (23)$$

On en déduira donc les relations correspondantes sur les crochets de Poisson des fonctions σ^k , soit :

$$[\sigma^i, \sigma^j] = \varepsilon^{ijk} \sigma^k$$

qui peuvent être aisément vérifiées à partir de (22). Ces relations (23) doivent être jointes aux relations de Lie (17) pour définir complètement l'algèbre de Lie du groupe d'invariance pris dans son ensemble (bien entendu les crochets des σ^k avec les G_μ et les $M_{\mu\nu}$ sont nuls).

Pour mettre en évidence la signification physique de ces trois nouvelles constantes, tirons le vecteur relativiste de spin de l'expression du moment angulaire propre :

$$s_\mu = \frac{i}{2c} \varepsilon_{\mu\nu\alpha\beta} \dot{x}_\nu S_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} I \varepsilon_{\mu\nu\alpha\beta} b_\nu^{(4)} b_\alpha^{(\xi)} b_\beta^{(\xi)}$$

ou encore, le terme en $b_\alpha^{(4)} b_\beta^{(4)}$ s'annulant par antisymétrie :

$$\varepsilon_\mu = \frac{1}{2} I \varepsilon_{\mu\nu\alpha\beta} b_\nu^{(4)} b_\alpha^{(r)} l_\beta^{(r)}.$$

Si nous exprimons $b_\nu^{(4)}$ en fonction des trois autres vecteurs au moyen de (19) et contractons s_μ par l'un de ceux-ci, soit $b_\mu^{(i)}$, il vient :

$$s_\mu b_\mu^{(i)} = \frac{1}{2} \frac{1}{6} I \varepsilon_{\mu\nu\alpha\beta} \varepsilon_{\nu\lambda\rho} \varepsilon^{rst} l_\mu^{(i)} b_\alpha^{(k)} l_\beta^{(k)} b_\lambda^{(r)} b_\rho^{(s)} l_\rho^{(t)}$$

ce qui fournit après quelques calculs :

$$s_\mu b_\mu^{(i)} = -\frac{3}{6} I \varepsilon^{ijk} b_\alpha^{(j)} b_\alpha^{(k)} = \sigma^i.$$

Ainsi la projection du spin sur chacun des vecteurs du genre espace du tétrapode est la constante correspondante $s_\mu^{(i)} = \sigma^i$. Si nous nous souvenons que le spin est orthogonal à la vitesse unitaire nous voyons que *le spin est un vecteur d'espace propre rigidement lié au trièdre d'espace du tétrapode mobile*. Naturellement sa grandeur :

$$s_0 = \sqrt{s_\mu s_\mu}$$

est aussi constante.

Nous pouvons d'ailleurs particulariser la jauge en choisissant l'un des vecteurs, par exemple $b_\mu^{(3)}$ sur s_μ , ce qui est permis parce que la rotation nécessaire pour cela est indépendante du temps (il restera encore un degré de liberté dans le plan des nouveaux $b_\mu^{(1)}$ et $b_\mu^{(2)}$). Cela revient à choisir les deux constantes σ^1 et σ^2 nulles :

$$b_\mu^{(3)} b_\mu^{(1)} = 0 \quad b_\mu^{(3)} b_\mu^{(2)} = 0.$$

Comme $b_\mu^{(3)} b_\mu^{(3)} = 0$ cela signifie que $b_\mu^{(3)}$ est colinéaire au quatrième vecteur $b_\mu^{(4)}$. En d'autres termes, en raisonnant dans le système propre, le vecteur d'espace $\frac{d}{d\tau} \mathbf{b}^{(3)}$ est nul, autrement dit : *le spin est axe instantané de rotation dans le système propre*. Les vecteurs d'espace $\mathbf{b}^{(1)}$ et $\mathbf{b}^{(2)}$ qui restent orthogonaux à l'axe fixe $\mathbf{b}^{(3)}$, tournent autour de lui avec une vitesse angulaire Ω , et on a

$$\frac{d}{d\tau} \mathbf{b}^{(1)} = \Omega \mathbf{b}^{(2)}$$

et

$$\frac{d}{d\tau} \mathbf{b}^{(2)} = -\Omega \mathbf{b}^{(1)}$$

Ainsi

$$\Omega = \left(\frac{d}{d\tau} \mathbf{b}^{(1)} \right) \cdot \mathbf{b}^{(2)}$$

n'est autre que le scalaire constant

$$\omega^3 = b_\mu^{(1)} b_\mu^{(2)} = \sigma^3 / I.$$

Ainsi le mouvement de rotation dans le système propre est uniforme, le spin prend l'expression

$$s_\mu = (b_\mu^{(1)} l_\mu^{(2)}) l_\mu^{(3)}$$

et sa grandeur est

$$s_0 = \sigma^3 = I \omega^3,$$

ce qui fournit comme conséquence du choix de la jauge, une relation importante (et tout à fait classique) entre les constantes du mouvement [28].

Enfin, en utilisant l'expression du spin

$$s_\mu = s_0 b_\mu^{(3)},$$

nous pouvons exprimer le moment angulaire propre en fonction du spin et du balourd t_μ , par la formule bien connue [6] :

$$S_{\mu\nu} = \frac{i}{c} \varepsilon_{\mu\nu\alpha\beta} \dot{x}_\alpha \varepsilon_\beta - \frac{1}{c} (t_\mu \dot{x}_\nu - t_\nu \dot{x}_\mu)$$

soit :

$$S_{\mu\nu} = -s_0 \varepsilon_{\mu\nu\alpha\beta} l_\alpha^{(4)} l_\beta^{(3)} + I (b_\mu^{(4)} b_\nu^{(4)} - b_\nu^{(4)} b_\mu^{(4)})$$

soit, en tenant compte des relations (19) :

$$S_{\mu\nu} = s_0 (l_\mu^{(1)} l_\nu^{(2)} - l_\nu^{(1)} l_\mu^{(2)}) + I (b_\mu^{(4)} b_\nu^{(4)} - b_\nu^{(4)} b_\mu^{(4)}).$$

On voit que c'est une généralisation de l'expression considérée dans la section précédente. Du reste, si on contracte par $\omega_{\mu\nu} = b_\mu^{(2)} b_\nu^{(1)}$, on obtient :

$$T = \frac{1}{4} S_{\mu\nu} \omega_{\mu\nu} = \frac{1}{2} (s_0 b_\mu^{(1)} b_\mu^{(2)} + I b_\mu^{(4)} b_\mu^{(4)}).$$

Le premier terme est bien le Lagrangien linéaire de la section précédente, le second est une conséquence de l'existence d'un balourd. Nous voyons donc, en conclusion, quelle relation étroite il y a entre les deux formes proposées par le Lagrangien.

V. Forme spinorielle des conditions de jauge. — Le modèle du tétrapode a été récemment relié par T. Takabayasi [18], [29] à la représentation spinorielle habituelle des fonctions d'onde quantique. Soit ψ un spineur de Dirac, normé en posant :

$$(\bar{\psi}\psi)^2 - (\bar{\psi}\gamma_5\psi)^2 = 1 \text{ avec } \bar{\psi} = \psi^\dagger \gamma_4$$

(ψ^\dagger est le conjugué hermitien de ψ). On forme le vecteur du genre temps et le pseudovecteur du genre espace habituels, tous deux normés et orthogonaux l'un à l'autre :

$$l_\mu^{(4)} = \bar{\psi} \gamma_\mu \psi$$

$$b_\mu^{(3)} = i \bar{\psi} \gamma_5 \gamma_\mu \psi.$$

Puis on introduit les spineurs conjugués de charge ψ^c en utilisant la matrice de conjugaison de charge C ($C^+ C = 1$, $C^+ = -C$) qui transforme chaque matrice γ_μ en sa transposée γ_μ^T :

$$\gamma_\mu^T = -C^{-1} \gamma_\mu C$$

d'où :

$$\gamma_5^T = + C^{-1} \gamma_5 C.$$

Les spineurs conjugués de charge sont alors :

$$\psi^c = C \bar{\psi}^T,$$

d'où :

$$(\bar{\psi})^c = - \psi^T C^{-1}.$$

On peut ensuite former deux nouveaux vecteurs :

$$\begin{cases} b_\mu^{(1)} = \frac{1}{2} (\bar{\psi}^c \gamma_\mu \psi - \bar{\psi} \gamma_\mu \psi^c) \\ b_\mu^{(2)} = \frac{1}{2i} (\bar{\psi}^c \gamma_\mu \psi + \bar{\psi} \gamma_\mu \psi^c). \end{cases} \quad (24)$$

On peut montrer facilement que ces nouveaux vecteurs sont tous deux du genre espace, qu'ils sont réels, normés, orthogonaux l'un à l'autre et aux deux précédents, si bien que nous avons ici un tétrapode semblable à celui que nous avons défini dans la section III. Si une équation d'onde (ou plus généralement un Lagrangien) est donnée en fonction du spineur ψ , elle peut aussi être exprimée en fonction du tétrapode correspondant, ce qui peut mettre en évidence une interprétation physique suggestive.

Nous nous bornerons ici à montrer le lien des transformations de jauge mises en évidence dans le cas des deux Lagrangiens étudiés ci-dessus, avec celles qu'on considère généralement dans les équations d'onde spinorielles. Une transposition semblable de la forme spinorielle dans celle du tétrapode a déjà été proposée par l'un de nous [30] en associant des bases spinorielles et vectorielles particulières. En premier lieu, considérons la jauge spinorielle la plus fréquemment utilisée, conservant par exemple l'équation de Dirac et l'ensemble des seize grandeurs tensorielles attachées au formalisme de Dirac, soit :

$$\psi' = e^{ir} \psi,$$

r étant un nombre réel. $b_\mu^{(4)}$ et $b_\mu^{(3)}$ restent évidemment invariants. Mais on voit immédiatement que les spineurs conjugués de charge deviennent :

$$\psi'^c = e^{-ir} \psi^c \quad \bar{\psi}'^c = e^{ir} \bar{\psi}^c$$

d'où on tire :

$$\begin{aligned} \bar{\psi}' \gamma_\mu \psi'^c &= e^{-2ir} \bar{\psi} \gamma_\mu \psi^c \\ \bar{\psi}'^c \gamma_\mu \psi' &= e^{2ir} \bar{\psi}^c \gamma_\mu \psi. \end{aligned}$$

Nos deux premiers vecteurs deviennent alors :

$$\begin{aligned} b_\mu'^{(1)} &= b_\mu^{(1)} \cos 2r - b_\mu^{(2)} \sin 2r \\ b_\mu'^{(2)} &= b_\mu^{(1)} \sin 2r + b_\mu^{(2)} \cos 2r. \end{aligned}$$

Donc une telle transformation de jauge fait tour-

ner les vecteurs $b_\mu^{(1)}$, $b_\mu^{(2)}$ autour du vecteur fixe $b_\mu^{(3)}$ dans l'espace propre. Nous retrouvons ainsi le groupe de jauge du Lagrangien linéaire de notre section III.

Considérons maintenant une transformation de jauge plus compliquée mettant en jeu la conjugaison de charge, qui a été proposée récemment par Pauli [31] comme une transformation canonique linéaire d'un grand intérêt :

$$\psi' = \alpha \psi + \beta \gamma_5 \psi^c \quad (25)$$

d'où

$$\bar{\psi}' = \alpha^* \bar{\psi} - \beta^* \bar{\psi}^c \gamma_5$$

où α et β sont deux nombres complexes quelconques vérifiant la relation :

$$\alpha \alpha^* + \beta \beta^* = 1.$$

ce qui ne laisse que trois degrés de liberté. Si on porte les équations (25) dans l'expression de $b_\mu^{(4)}$, celle-ci devient :

$$b_\mu'^{(4)} = (\alpha^* \bar{\psi} - \beta^* \bar{\psi}^c \gamma_5) \gamma_\mu (\alpha \psi + \beta \gamma_5 \psi^c).$$

Le calcul s'exécute sans peine en exprimant les spineurs conjugués de charge au moyen de la matrice de conjugaison C . Celle-ci peut sauter par dessus chaque matrice γ en la transformant en sa transposée. Il faut remarquer que toute expression bilinéaire $\bar{\psi} A \psi$ est égale à sa transposée $(\bar{\psi} A \psi)^T$ qui symbolise un ordre différent des opérations :

$$\bar{\psi} A \psi = (\bar{\psi} A \psi)^T = \psi^T A^T \bar{\psi}^T.$$

Grâce à cette remarque, on peut montrer que :

$$\begin{aligned} \bar{\psi}^c \gamma_\mu \psi^c &= \psi^T \gamma_\mu^T \bar{\psi}^T = \bar{\psi} \gamma_\mu \psi \\ \bar{\psi}^c \gamma_5 \gamma_\mu \psi &= \psi^T \gamma_5^T \gamma_\mu^T (\bar{\psi}^c)^T = - \bar{\psi}^c \gamma_5 \gamma_\mu \psi = 0 \end{aligned}$$

et de même

$$\bar{\psi} \gamma_5 \gamma_\mu \psi^c = (\psi^c)^T \gamma_5^T \gamma_\mu^T (\bar{\psi})^T = - \bar{\psi} \gamma_5 \gamma_\mu \psi^c = 0.$$

Finalement, il ne reste que :

$$b_\mu'^{(4)} = (\alpha^* \alpha + \beta^* \beta) \bar{\psi} \gamma_\mu \psi = b_\mu^{(4)}.$$

Nous voyons que le vecteur $b_\mu^{(4)}$ est invariant sous la transformation de jauge considérée. Au contraire, si on fait le même calcul sur $b_\mu^{(3)}$, il vient

$$b_\mu'^{(3)} = (\alpha^* \alpha - \beta^* \beta) b_\mu^{(3)} + i(\alpha^* \alpha - \beta^* \alpha) b_\mu^{(1)} + (\alpha^* \beta + \beta^* \alpha) b_\mu^{(2)}.$$

Ce vecteur est évidemment orthogonal à $b_\mu^{(4)}$ et on voit facilement que : $b_\mu^{(3)} b_\mu^{(3)} = 1$.

Pour appliquer la transformation (25) aux vecteurs (24), il faut utiliser une nouvelle identité qu'on démontre comme les précédentes :

$$\bar{\psi}^c \gamma_\mu \gamma_5 \psi^c = \psi^T \gamma_\mu^T \gamma_5^T \bar{\psi}^T = - \bar{\psi} \gamma_\mu \gamma_5 \psi.$$

Nous avons alors les transformations suivantes :

$$\begin{aligned}\bar{\psi}'^c \gamma_\mu \psi' &= \alpha^2 \bar{\psi}^c \gamma_\mu \psi - \beta^2 \bar{\psi} \gamma_\mu \psi^c + 2\alpha\beta \bar{\psi} \gamma_5 \gamma_\mu \psi \\ \bar{\psi}' \gamma_\mu \psi'^c &= \alpha^{*2} \bar{\psi} \gamma_\mu \psi^c - \beta^{*2} \bar{\psi}^c \gamma_\mu \psi + 2\alpha^*\beta^* \bar{\psi}^c \gamma_5 \gamma_\mu \psi\end{aligned}$$

ce qui donne pour les vecteurs :

$$\begin{aligned}l_\mu^{(1)} &= \frac{1}{2}(\alpha^2 + \beta^{*2} + \alpha^{*2} + \beta^2) l_\mu^{(1)} \\ &\quad + \frac{i}{2}(\alpha^2 + \beta^{*2} - \alpha^{*2} - \beta^2) l_\mu^{(2)} - i(\alpha\beta - \alpha^*\beta^*) l_\mu^{(3)} \\ b_\mu^{(2)} &= \frac{1}{2}(\alpha^2 - \beta^{*2} + \alpha^{*2} - \beta^2) l_\mu^{(2)} \\ &\quad - \frac{i}{2}(\alpha^2 - \beta^{*2} - \alpha^{*2} + \beta^2) l_\mu^{(1)} - (\alpha\beta + \alpha^*\beta^*) l_\mu^{(3)}.\end{aligned}$$

Sur ces expressions, on vérifie aisément les autres relations d'orthonormalité sur $b_\mu^{(1)}$, $b_\mu^{(2)}$, $b_\mu^{(3)}$.

Pour nous résumer, nous avons montré que la transformation de jaune spinorielle de Pauli exprimée en fonction du tétrapode de Takabayasi est équivalente à une rotation tridimensionnelle des vecteurs du genre espace $b_\mu^{(1)}$, $b_\mu^{(2)}$, $b_\mu^{(3)}$ qui laisse $b_\mu^{(4)}$ invariant. Il nous paraît intéressant de faire remarquer que c'est là justement le groupe de jauge que nous avons mis en évidence dans le Lagrangien que nous avons étudié dans notre section IV, et qui a été utilisé par la suite pour la théorie des particules de Bohm-Hillion-Vigier.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] NOETHER (E.), *Gotting. Nachr.*, 1918, 235.
- [2] HALBWACHS (F.), *Prog. Theor. Physics*, 1960, **24**, 291.
- [3] HALBWACHS (F.) et VIGIER (J. P.), *C. R. Acad. Sc.*, 1959, **248**, 490.
- [4] WEYSSENHOFF et RAABE, *Acta Phys. Polon.*, 1947, **9**, 8.
- [5] DE BROGLIE (L.), *Théorie des particules de spin 1/2*, Gauthier-Villars, 1952.
- [6] HALBWACHS (F.), *Théorie des fluides à spin*, Gauthier-Villars, 1960.
- [7] TAKABAYASI (T.), *Prog. Theor. Physics*, 1960, **23**, 915.
- [8] BOUCHIAT (C.) et MICHEL (L.), *Phys. Rev.*, 1955, **106**, 170.
- [9] YUKAWA, *Phys. Rev.*, 1953, **91**, 415 et 416.
- [10] RAYSKI, *Acta Phys. Polon.*, 1950, **10**, 103 ; *Proc. Phys. Soc.*, London, 1951, A **64**, 957.
- [11] BOHM et VIGIER, *Phys. Rev.*, 1958, **109**, 1882.
- [12] MATHISSON, *Acta Phys. Polon.*, 1937, **6**, 163 et 218.
- [13] LUBANSKI, *Acta Phys. Polon.*, 1937, **6**, 356.
- [14] HALBWACHS, HILLION et VIGIER, *Nuovo Cimento*, 1960, **15**, 209.
- [15] HALBWACHS, HILLION et VIGIER, *Ann. Inst. H. Poincaré*, 1959, **16**, 115.
- [16] BOHM, HILLION et VIGIER, *Prog. Theor. Physics*, 196, **24**, 761.
- [17] UNAL et VIGIER, *C. R. Acad. Sc.*, 1957, **245**, 1787 et 1891.
- [18] TAKABAYASI (T.), *C. R. Acad. Sc.*, 1958, **246**, 64.
- [19] HALBWACHS (F.), *Acta Phys. Polon.*, 1960, **19**, 93.
- [20] BOHM, HILLION, TAKABAYASI et VIGIER, *Prog. Theor. Physics*, 1960, **23**, 496.
- [21] FRENKEL, *Z. Physik*, 1926, **37**, 243.
- [22] NAKANO, *Prog. Theor. Physics*, 1956, **15**, 333.
- [23] HALBWACHS et VIGIER, *Nuovo Cimento*, 1959, **11**, 882.
- [24] OSTROGRADSKI, *Mém. Acad. St. Péters.*, 1850, **6**, 385.
- [25] WEYSSENHOFF, *Acta Phys. Polon.*, 1952, **11**, 55.
- [26] HALBWACHS et VIGIER, *C. R. Acad. Sc.*, 1959, **248**, 1124.
- [27] HALBWACHS, *C. R. Acad. Sc.*, 1959, **249**, 2500. HALBWACHS, HILLION et VIGIER, *C. R. Acad. Sc.*, 1960, **250**, 471.
- [28] HALBWACHS, *C. R. Acad. Sc.*, 1959, **249**, 2293. DE BROGLIE et VIGIER, *C. R. Acad. Sc.*, 1959, **249**, 2225.
- [29] TAKABAYASI, *Nuovo Cimento*, 1959, **13**, 332.
- [30] SOURIAU (J. M.), *C. R. Acad. Sc.*, 1957, **244**, 2779 ; 1958, **246**, 3588.
- [31] PAULI, *Nuovo Cimento*, 1957, **6**, 204.

VISCOSITÉ ET BIRÉFRINGENCE DYNAMIQUE DES MACROMOLÉCULES SOUPLES

Par ANTON PETERLIN,

Physikalisches Institut, Technische Hochschule, München, Allemagne.

Résumé. — Si l'on introduit les valeurs moyennes de distances intramoléculaires, correspondant à une valeur donnée du gradient de vitesse, on peut calculer pour le modèle de l'altère élastique la viscosité intrinsèque et la biréfringence dynamique dans tout le domaine du gradient de 0 à ∞ . La viscosité intrinsèque décroît d'abord jusqu'à un minimum puis croît lentement mais constamment par suite de l'extension progressive de la pelote macromoléculaire, supposée parfaitement souple. La biréfringence d'écoulement change moins dans ce cas que selon les résultats obtenus par la théorie simple qui ne tient pas compte de la variation de l'interaction hydrodynamique avec l'extension de la macromolécule. Les résultats présentés ne sont valables que pour des molécules infiniment longues et parfaitement souples. La longueur finie et la rigidité partielle des macromolécules réelles provoquent des effets de saturation qui vont être traités séparément.

Abstract. — Intrinsic viscosity and dynamic double refraction can be calculated for all values of velocity gradient between 0 and ∞ , in the case of an elastic dumbbell, when, for a given velocity gradient, the mean values of intramolecular distances are introduced. Then the intrinsic viscosity first decreases to a minimum value and then slowly increases with velocity gradient, because of progressive stretching of the supposed perfectly flexible macromolecule. Dynamic double refraction is less varying in this theory than in the simpler one which does not take into account variation of hydrodynamic interaction with stretching of the macromolecule.

The results obtained are valid only for infinitely long and perfectly flexible molecules. Effects of saturation due to finite length and partial stiffness of macromolecules will be reported elsewhere.

1. Pour l'étude des macromolécules linéaires en solution idéale (à la température θ de Flory) le modèle de Rouse [1] est le plus approprié. La chaîne à Z chaînons, statistiquement indépendants, possède Z modes à l'aide desquels le mouvement de la chaîne et de tous ses chaînons dans l'écoulement laminaire peut être déterminé.

L'interaction hydrodynamique modifie les valeurs propres de tous les modes, la modification dépendant essentiellement des distances actuelles entre les chaînons. Puisque celles-ci elles-mêmes sont déterminées par les valeurs propres de tous les modes, le problème devient d'autant plus compliqué que jusqu'alors on n'a pas encore réussi de trouver une solution exacte et complète dans tout le domaine du gradient de vitesse G de 0 à ∞ .

Pour simplifier le problème on a d'abord remplacé la distance actuelle entre les chaînons j et k par la valeur moyenne h_{jk} (2,3)

$$\langle 1/r_{jk} \rangle = \sqrt{6/\pi} / h_{jk} \\ h_{jk}^2 = \langle r_{jk}^2 \rangle = b^2 |j - k| \quad (1)$$

b = longueur du chaînon que l'on trouve en solution au repos. Avec cette hypothèse la viscosité intrinsèque devient indépendante du gradient de vitesse [3]. Ce résultat contraire à l'évidence expérimentale est une conséquence de l'invariabilité des distances intramoléculaires moyennes (éq. 1). Il s'ensuit que ce ne sont que les valeurs initiales

de $[\eta]$, $\Delta n/G$ et $\text{ctg } 2\chi$ qui sont représentées correctement par le modèle de Rouse à interaction hydrodynamique constante [3, 4].

La situation change si l'on se rend compte de l'extension de la pelote macromoléculaire dans l'écoulement. L'interaction hydrodynamique entre deux chaînons décroît avec G croissant par suite de l'accroissement de la distance mutuelle moyenne. En remplaçant $\langle 1/r \rangle$ par une fonction linéaire

$$\langle 1/r \rangle = A + B \langle r^2 \rangle^{1/2} = A + Bh \quad (2)$$

et introduisant pour $\langle r^2 \rangle$ le carré moyen de la distance correspondant à la valeur actuelle du gradient de vitesse, Zimm [5] a pu montrer que la viscosité intrinsèque décroissait avec G dans tout le domaine de G

$$[\eta]_G = [\eta]_0 (1 - \alpha G^2 + \dots) \quad (3)$$

ce qui correspond, du moins qualitativement, à l'expérience.

Le choix d'une valeur moyenne h en fonction du gradient néglige le fait que les distances intramoléculaires changent deux fois pendant une rotation du maximum au minimum dans les directions respectives de dilatation et de compression maximales de l'écoulement laminaire. En outre il est difficile d'évaluer précisément l'influence de l'approximation linéaire (éq. 2) qui sûrement empêche l'application de la méthode aux grandes valeurs du gradient. Il s'ensuit que de cette manière on ne

peut pas calculer avec une précision suffisante la viscosité intrinsèque et la biréfringence dynamique dans tout le domaine de G , de 0 à ∞ , bien que les déviations initiales des valeurs constantes, que l'on avait obtenu auparavant par le modèle à l'interaction hydrodynamique constante, aient le sens correct.

La situation est plus favorable avec le modèle de l'altère élastique qui ne rend compte que du premier mode du modèle de Rouse. Mais puisque ce mode représente exactement le mouvement de base de la pelote macromoléculaire dans l'écoulement laminaire — en moyenne les deux extrémités ont des vitesses exactement opposées et la même situation se retrouve dans le mouvement des deux moitiés de la macromolécule (fig. 1) — généra-

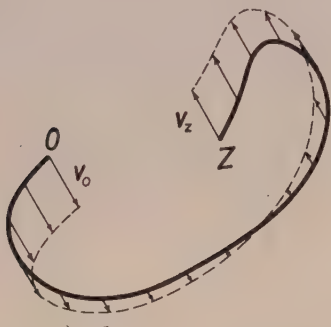


FIG. 1. — Mouvement moyen des chaînons de la macromolécule pelotonnée dans l'écoulement laminaire linéaire. Les vitesses des chaînons correspondants dans les deux moitiés ont même valeur mais sens opposé.

lement les valeurs initiales de $[\eta]$, $\Delta n/G$ et $\text{ctg } 2\chi$ calculées d'après le modèle de l'altère ne diffèrent de celles du modèle de Rouse que par les constantes multiplicatives. C'est pourquoi on s'attend à obtenir bien plus aisément à l'aide de ce modèle les traits caractéristiques du comportement de la pelote macromoléculaire dans l'écoulement laminaire sans avoir besoin d'introduire des approximations trop vagues n'ayant aucune raison physique et dues pour la plupart aux difficultés du traitement mathématique du modèle.

2. En ce qui suit on adoptera les mêmes suppositions qui ont été introduites par Kirkwood-Riseman [2] et Zimm [3, 4] sauf la substitution de $\langle 1/r \rangle$ par une fonction linéaire de h (eq. 2). C'est-à-dire, pour chaque valeur du gradient on introduira la valeur correspondante moyenne de distance réciproque $\langle 1/r \rangle$ sans se rendre compte de sa variation considérable pendant la rotation de la pelote. Pour les extrémités cette valeur s'obtient de la fonction de répartition, qui dans un champ de vitesse

$$v = (0, Gx, 0), \quad (4)$$

s'écrit [6]

$$\Phi = \frac{(\mu/\pi)^{3/2}}{(1 + \beta^2)^{1/2}} e^{-\mu[(1 + 2\beta^2)x^2 - 2\beta xy + y^2 + (1 + \beta^2)z^2]/(1 + \beta^2)}$$

$$\mu = 3/2 h_0^2 = 3/2 Z b^2 \quad (5)$$

$$\beta = G/4 \mu D = M[\eta] \eta_0 G/N_A kT$$

$D = kT/\eta_0 W$ constante de diffusion des extrémités, η_0 viscosité du solvant, M masse moléculaire de la macromolécule, N_A nombre d'Avogadro, k constante de Boltzmann, T température absolue. On a [7]

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \sqrt{\frac{6}{\pi}} \frac{1}{h_0} \frac{F(k, \varphi)}{\sqrt{2\beta\sqrt{1 + \beta^2}}}, \quad (6)$$

F intégrale elliptique du premier ordre avec

$$k^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\beta}{\sqrt{1 + \beta^2}} \right) \quad (7)$$

$$\sin^2 \varphi = \frac{\beta}{k^2 \sqrt{1 + \beta^2}}.$$

En se servant de la fonction de répartition des chaînons (8) on obtient pour les distances intramoléculaires réciproques moyennes

$$\left\langle \frac{1}{r_m} \right\rangle = \sqrt{\frac{6}{\pi}} \frac{1}{b\sqrt{m}} \frac{F(k, \varphi)}{\sqrt{2\beta\sqrt{1 + \beta^2}}} \sqrt{\frac{1 + 2\beta^2/3}{1 + \frac{m-1}{Z+1} \frac{2\beta^2}{3}}} \quad (8)$$

$$m = |j - k|.$$

Si l'on compare les distances réciproques moyennes à différents m , on voit que l'extension de la pelote macromoléculaire n'est pas uniforme, les parties éloignées (m grand) s'étirant beaucoup plus que les parties voisines (m petit).

L'interaction hydrodynamique modifie le coefficient de résistance moyenne de translation W [7]

$$W = \frac{\pi a Z}{1 + e\xi}$$

$$e = \frac{2}{3} \sqrt{\frac{6}{\pi}} \frac{a\sqrt{Z}}{b}$$

$$\xi = Sf/0,598$$

$$S = \left[\sum_{m=1}^{Z/2} \left(\frac{m}{Z} \right)^{-1/2} - 2 \sum_1^Z \left(\frac{m}{Z} \right)^{1/2} - 2 \sum_1^{Z/2} \left(\frac{m}{Z} \right)^{3/2} \right. \\ \left. - 2 \sum_{Z/2+1}^Z \left(\frac{m}{Z} \right)^{3/2} \right] \cdot \frac{1/Z}{\sqrt{1 + \frac{m-1}{Z-1} \frac{2\beta^2}{3}}} \quad (9)$$

$$\frac{1}{Z} \sum_{m=1}^Z \sqrt{\frac{Z}{m}} \cdot \frac{s(m/Z)}{\sqrt{1 + \frac{m-1}{Z-1} \frac{2\beta^2}{3}}}$$

$$f = F(k, \varphi) \sqrt{\frac{1 + 2\beta^2/3}{2\beta\sqrt{1 + \beta^2}}}$$

a = rayon hydrodynamique du chaînon. Le remplacement du coefficient 1,196 [9] dans e par le facteur semi-empirique $2/3$ [9, 10] tient compte des approximations dans le calcul des moyennes. La distribution spatiale des chaînons est considérée par le facteur $Z/6$ [11] dans W qui remplace le facteur original $Z/4$ de Kuhn [12]. En accord avec les suppositions, à β constant, on ne se tient pas compte des variations de W pendant la rotation de la macromolécule. La valeur moyenne d'après l'équation 9 détermine le paramètre β et par conséquence la fonction de répartition $\Phi(\beta)$.

La variation de W en fonction de β est déterminée par les facteurs S et f . En cas d'extension uniforme de la pelote macromoléculaire le facteur commun en S deviendrait $1/\sqrt{1 + 2\beta^2/3}$ et la somme serait égale à 0,598. Il s'ensuivrait que le produit $\xi = Sf/0,598$ décroîtrait et la viscosité intrinsèque, proportionnelle à W , croîtrait constamment avec le gradient en désaccord complet avec l'expérience. Ce n'est que la non-uniformité de l'extension qui donne lieu à un caractère plus réel. Puisque la sommation en S contient le facteur $s(m/Z)$ de signe différent pour m petit et grand respectivement (fig. 2), le facteur commun, fonc-

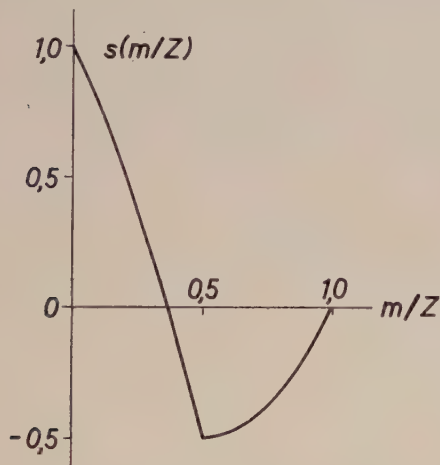


FIG. 2. — La fonction $s(m/Z)$ de l'équation 9.

tion de $(m - 1)/(Z - 1)$ fait disparaître plus vite les termes négatifs, correspondant à m grand. En conséquence le produit ξ en fonction de β commence par croître pour β petit jusqu'à un maximum, décroît ensuite très lentement et finit par disparaître pour $\beta = \infty$.

3. La viscosité intrinsèque [7] peut être calculée à partir de β (équ. 5)

$$[\eta] = \frac{N_A h_0^2 W}{6M} = \frac{N_A b^2}{6M_0} \frac{\pi aZ}{1 + e\xi} \quad (10)$$

M_0 masse moléculaire du chaînon. Pour une molé-

cule assez grande, $Z \rightarrow \infty$, la viscosité relative

$$[\eta]_{\text{rel}} = \frac{[\eta]}{[\eta]_0} = \frac{1 + e}{1 + e\xi} = \frac{1 + 1/e}{\xi + 1/e} \quad (11)$$

s'approche de $1/\xi$

$$[\eta]_{\text{rel}, Z=\infty} = 1/\xi = 1 - 0,1524 \beta^2 + 0,0593 \beta^4 \dots \quad (12)$$

Normalement on trace $[\eta]_{\text{rel}}$ sur G ou β_0

$$\beta_0 = \frac{M[\eta]_0 \eta_0}{N_A kT} G = \beta \frac{[\eta]_0}{[\eta]} \quad (13)$$

Pour une comparaison avec l'expérience on doit alors remplacer β par β_0 . On obtient

$$[\eta]_{\text{rel}, Z=\infty} = 1 - 0,1524 \beta_0^2 + 0,1058 \beta_0^4 \dots \quad (14)$$

La viscosité relative décroît d'abord jusqu'à un minimum puis croît assez lentement mais constamment avec le gradient (fig. 3). La courbe com-

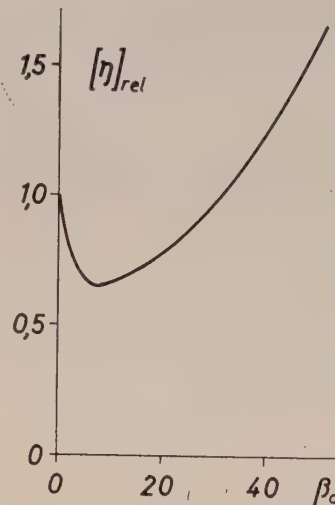


FIG. 3. — Viscosité intrinsèque relative $([\eta]/[\eta]_0)_{Z=\infty}$ en fonction de β .

mence par une tangente horizontale (équ. 14). Cette partie initiale disparaît pratiquement dans la figure 3 à cause de l'échelle trop petite pour l'abscisse β_0 .

L'accroissement final de la viscosité intrinsèque résulte de l'extension de la pelote macromoléculaire dans l'écoulement. Si la molécule n'est pas parfaitement souple et résiste au changement de forme (viscosité interne de Kuhn [13] et Cerf [4]) ou bien si la molécule a une longueur finie, ce qui est toujours le cas, l'extension devient plus petite que ne l'exige l'équation 5 et par conséquent l'accroissement de $[\eta]_{\text{rel}}$ est fortement réduit et peut même disparaître complètement [14]. Tout de même il y a quelques mesures de viscosité, bien entendu en solutions trop concentrées pour que l'extrapolation à dilution infinie soit encore possible, qui montrent

une variation semblable à celle de la figure 3. Ce phénomène de « dilatation » a été trouvé par Selby et Hunstad [15] sur des solutions extrêmement visqueuses ($\eta_0 \sim 10^4 P$) des polysiloxanes dans des huiles de graissage et par Merrill [16] sur des solutions de polyisobutylène dans le benzène. On doit attendre que des expériences ultérieures à concentration plus basse, permettant une extrapolation à la viscosité intrinsèque, confirment ou non la conclusion que cet effet est, du moins partiellement, dû à l'extension des pelotes macromoléculaires dans un milieu d'autant visqueux que la résistance interne n'intervient plus sensiblement.

4. La biréfringence dynamique résulte de l'anisotropie de l'indice de réfraction dans le champ d'écoulement laminaire. On a généralement

$$\Delta n = \frac{1}{2n} \sqrt{(n_{yy}^2 - n_{xx}^2)^2 + 4n_{xy}^2}$$

$$= \frac{4\pi}{5n} \left(\frac{n^2 + 2}{3} \right)^2 \frac{N_A}{M} (\alpha_1 - \alpha_2) \beta \sqrt{1 + \beta^2} \quad (15)$$

$$\text{ctg } 2\chi = \frac{n_{yy}^2 - n_{xx}^2}{2n_{xy}^2} = \beta$$

α_1 et α_2 sont les polarisabilités optiques du chaînon dans la direction parallèle et perpendiculaire à l'axe du chaînon. La variation de l'interaction hydro-

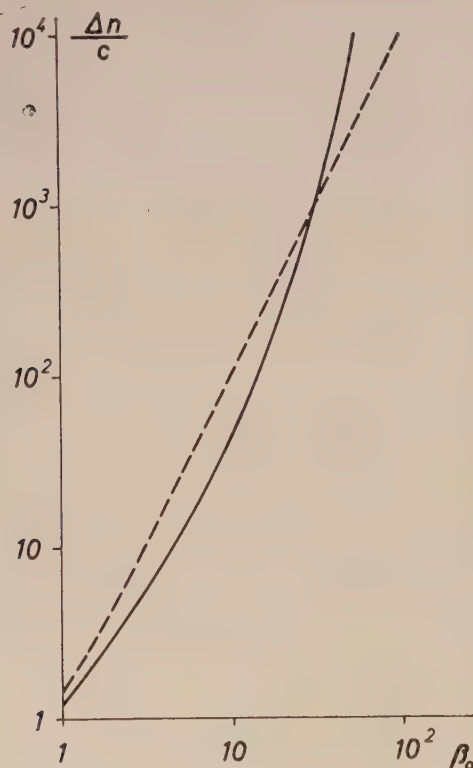


FIG. 4. — Biréfringence dynamique $\Delta n/C = (\Delta n/c) : [(4\pi/45n) (n^2 + 2)^2 N_A (\alpha_1 - \alpha_2) / M]$ en fonction de β_0 pour le modèle à interaction hydrodynamique constante (— — —) et variable (—).

dynamique avec β n'influe que sur le rapport β/β_0 , c'est-à-dire sur l'échelle des abscisses. Les résultats d'après l'équation 15 ne diffèrent de celles du modèle de Rouse que par l'angle d'extinction où β est à remplacer par $0,4 \beta$ [3]. Sur la figure 4 et 5, on a tracé

$$\Delta n : \frac{4\pi}{5n} \left(\frac{n^2 + 2}{3} \right)^2 \frac{N_A (\alpha_1 - \alpha_2) C}{M} = \frac{\Delta n}{C}$$

et χ en fonction de β_0 et, à la fin de comparaison, les courbes respectives à l'interaction constante

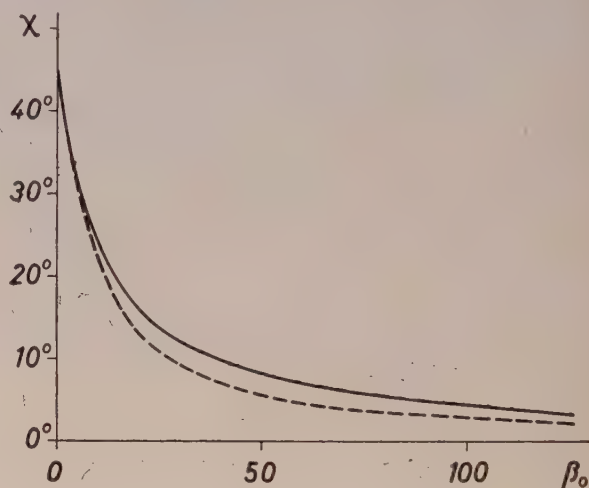


FIG. 5. — Angle d'extinction χ en fonction de β_0 pour le modèle à interaction hydrodynamique constante (— — —) et variable (—).

($\beta = \beta_0$) qui correspondent aussi au cas sans interaction hydrodynamique [6]. On voit que les courbes pour lesquelles l'interaction est fonction de β restent moins inclinées sur l'axe des abscisses, du moins au commencement, coupent ensuite les courbes à l'interaction constante à la valeur β_0 pour laquelle $[\eta]_\beta = [\eta]_0$ et à partir de là continuent avec une pente plus grande. Sûrement on ne doit pas oublier que la longueur finie des macromolécules réelles limite l'extension de la pelote et par conséquent la valeur de la biréfringence ne peut pas dépasser celle correspondant aux molécules complètement étendues. Ces effets de saturation vont être traités prochainement [17].

La valeur initiale de la biréfringence dynamique spécifique (constante spécifique de Maxwell)

$$M_{sp} = \left(\frac{\Delta n}{ncG\eta_0} \right)_{G=0, G=0} = \frac{4\pi}{5} \left(\frac{n^2 + 2}{3n} \right)^2 (\alpha_1 - \alpha_2) \frac{[\eta]}{kT} \quad (16)$$

ne diffère pas de celle qui l'on obtient sans considérer la variation de l'interaction hydrodynamique avec l'extension de la pelote. On trouve la même situation pour l'angle d'extinction. La pente initiale

$$-\left(\frac{d\chi}{dG} \right)_{G=0} = \frac{1}{2} \left(\frac{\beta}{G} \right)_{G=0} = \frac{1}{2} \frac{M[\eta]_0}{N_A kT} \eta_0 \quad (17)$$

est proportionnelle à la viscosité du solvant. Il s'ensuit qu'à l'aide de ce modèle on ne peut pas reproduire l'effet spécial découvert par Cerf [18] et étudié ensuite surtout par Leray [19], qui fait que la valeur limite de $(d\chi/dG)_{G=0}$ n'est pas proportionnelle à la viscosité du solvant

$$-\left(\frac{d\chi}{dG}\right)_{G=0} = A + B\eta_0 \quad (18)$$

Pour expliquer cet effet il faut introduire la notion de viscosité interne de la macromolécule comme l'a fait Cerf [4]. Mais il reste à voir comment ses résultats doivent être modifiés pour obtenir un accord satisfaisant en viscosité intrinsèque où la variation de l'interaction hydrodynamique, complètement négligée par Cerf, suffit pratiquement pour expliquer quantitativement la diminution ini-

tiale de la viscosité relative. A l'exception de la déviation initiale (premier terme dans la série en G^2) les calculs présentés jusqu'alors par Cerf ne peuvent pas être comparés aux courbes expérimentales. Même dans le premier terme contenant G^2 la variation des dimensions linéaires de la pelote influe sensiblement sur le coefficient : l'équation 14 exige 0,1524, le calcul de Cerf une valeur entre 0,72 et 1,71 pour des molécules rigides [Kuhn [13] obtient la valeur 2] et entre 0,113 et 1,436 fois $F/Za\eta_0$ pour des molécules souples. $F/Za\eta_0$ est le rapport entre la résistance de la macromolécule à la déformation et la force de frottement par laquelle le solvant tend à déformer la pelote.

Manuscrit reçu le 23 février 1961.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] ROUSE (P. E., Jr.), *J. Chem. Physics*, 1953, **21**, 1272.
- [2] KIRKWOOD (J. G.) et RIEMAN (J.), *J. Chem. Physics*, 1948, **16**, 565.
- [3] ZIMM (B. H.), *J. Chem. Physics*, 1956, **24**, 269.
- [4] CERF (R.), *J. Physique Rad.*, 1958, **19**, 122.
- [5] ZIMM (B. H.), Conférence « Thermodynamique et mécanique des systèmes polymères » devant l'Académie des Sciences de New York, le 27 mai 1960, *Ann. New York Acad. Sci.*, 1961, **89/4**, 670.
- [6] HERMANS (J. J.), *Physica*, 1943, **10**, 777.
- [7] PETERLIN (A.), *J. Chem. Physics*, 1960, **33**, 1799.
- [8] PETERLIN (A.), HELLER (W.) et NAKAGAKI (M.), *J. Chem. Physics*, 1958, **28**, 470.
- [9] PETERLIN (A.), *J. Polym. Sc.*, 1950, **5**, 473.
- [10] IKEDA (E.), *J. Phys. Soc.*, Japan, 1957, **12**, 378.
- [11] KRAMERS (H. A.), *J. Chem. Physics*, 1946, **14**, 445.
- [12] KUHN (W.) et KUHN (H.), *Helv. Chim. Acta*, 1943, **26**, 1394.
- [13] KUHN (W.) et KUHN (H.), *Helv. Chim. Acta*, 1945, **28**, 1533 ; 1946, **27**, 72, 609, 830.
- [14] PETERLIN (A.), *Makromol. Chem.* 1961, **44-46**, 338.
- [15] SELBY (T. W.) et HUNSTAD (N. A.), ASTM Symposium sur la viscosité non Newtonienne, Washington, D. C., 11 octobre 1960.
- [16] MERRILL (E. W.), ASTM Symposium sur la viscosité non Newtonienne, Washington, D. C., 11 octobre 1960.
- [17] PETERLIN (A.), *Polymers* (sous presse).
- [18] CERF (R.), *Thèse*, Strasbourg, 1951.
- [19] LERAY (J.), *J. Polym. Sc.*, 1959, **23**, 167.

MESURE DIRECTE DE LA STRUCTURE HYPERFINE DU NIVEAU 6^3P_1 DE L'ISOMÈRE NUCLÉAIRE $^{197}\text{Hg}^*$ ⁽¹⁾

Par C. BROT,

Laboratoire de Chimie Physique de la Faculté des Sciences de Paris

Résumé. — On décrit la mesure, par une méthode de double résonance récemment développée, de l'intervalle hyperfin $F = 13/2 \rightarrow F = 11/2$ de l'état 6^3P_1 de l'isomère nucléaire $^{197}\text{Hg}^*$. Cette méthode est basée sur l'observation du changement de la longueur d'onde de la lumière réémise après transition de radiofréquence. La précision obtenue est de l'ordre de $6 \cdot 10^{-6}$.

Abstract. — The hyperfine interval $F = 13/2 \rightarrow F = 11/2$ in the 6^3P_1 state of the nuclear isomer $^{197}\text{Hg}^*$ has been measured using a recently developed double resonance method. This method depends on the observation of the wavelength change of the light re-emitted after the RF transition. The result obtained has a probable error of about 6×10^{-6} .

I. Principe de la mesure. — Le noyau ^{197}Hg possède, en plus de son niveau fondamental de durée de vie 65 heures et de spin $1/2$, un niveau isomérique, habituellement dénoté $^{197}\text{Hg}^*$, dont le spin est $13/2$ et la durée de vie 24 heures. Dans l'état excité 6^3P_1 de l'atome, cet isomère nucléaire présente donc trois composantes hyperfines dont les moments angulaires totaux sont $F = 11/2$, $F = 13/2$ et $F = 15/2$. Des mesures purement optiques [1] ont montré que les séparations hyperfines sont voisines de 14 kHz pour

$$F = 11/2 \rightarrow F = 13/2$$

et de 18 kHz pour $F = 13/2 \rightarrow F = 15/2$. Plus récemment des valeurs plus approchées ont été obtenues par H. Hirsh [2] en utilisant des techniques de croisement de niveaux et de double résonance dans des champs magnétiques « intermédiaires ».

Parallèlement au travail de Hirsch, nous avons employé une méthode de mesure directe en champ nul ou faible, qui nous a permis d'obtenir une

valeur précise de l'intervalle $F = 13/2 \rightarrow F = 11/2$. Cette méthode, due à Kohler [3] fait appel elle aussi aux techniques si fructueuses de double résonance optique-radiofréquence proposées, et expérimentées par Kastler, Brossel et Bitter [4], [5].

Elle consiste dans son principe à détecter la transition radiofréquence au moyen du changement de longueur d'onde (et non de polarisation) de la lumière réémise par l'échantillon. C'est dire que son applicabilité nécessite :

1) L'illumination sélective d'un seul des niveaux composantes de la structure.

2) La détection sélective de la lumière, de longueur d'onde différente, réémise par celui des autres niveaux vers lequel on a induit la transition de radiofréquence.

Il faut donc disposer d'une radiation lumineuse excitatrice qui coïncide, dans les limites de sa largeur Doppler, avec l'une et une seule des composantes de la raie étudiée. Il faut aussi que les séparations des composantes soient supérieures aux largeurs Doppler. Cette dernière condition est réa-

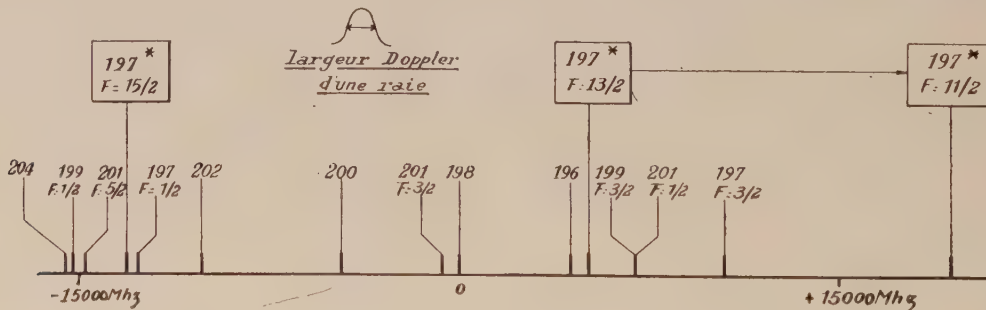


FIG. 1.

⁽¹⁾ Le présent travail a été effectué au Massachusetts Institute of Technology, Research Laboratory of Electronics.

lisée dans le cas des composantes hyperfines de la raie de résonance $^1S_0 - ^3P_1$ à 2 537 Å des différents isotopes du mercure.

Pour réaliser l'illumination sélective de l'un des niveaux hyperfins, on pourrait songer à construire une source lumineuse de longueur d'onde ajustable en sélectionnant, à l'aide d'un quart d'onde et d'un polariseur, l'une des composantes σ de la structure Zeeman d'émission d'un isotope pair ; cela nécessiterait que la source soit soumise à un champ magnétique élevé réglable dans de larges limites. Une solution plus élégante [3] consiste, quand cela est possible, à profiter des circonstances suivantes : Le mercure possède de nombreux isotopes et les déplacements isotopiques de leurs raies sont tels qu'il existe plusieurs coïncidences fortuites entre les composantes hyperfines pour les différents isotopes (fig. 1).

C'est ainsi que, dans notre cas, nous avons pu profiter de l'assez bonne coïncidence qui existe entre la raie de l'isotope 196 et la composante $F = 13/2$ de $^{197}\text{Hg}^*$: nous avons utilisé une lampe enrichie en ^{196}Hg .

Pour la détection sélective de la lumière réémise après transition de radiofréquence, il suffit d'absor-

ber la lumière primaire directement diffusée : une cellule d'absorption contenant le même isotope 196 remplit ce rôle. La raie réémise par le sous-niveau $F = 11/2$, se trouvant fort éloignée de toute autre raie des isotopes stables, n'est absolument pas absorbée.

II. Techniques expérimentales. — L'échantillon de mercure $^{197}\text{Hg}^*$ était préparé par bombardement d'une feuille d'or avec des deutons dans le cyclotron du M. I. T. (réaction $^{197}\text{Au}, d, 2n$). Le mercure produit était ensuite distillé sous vide dans une cellule de quartz en prenant les précautions décrites par Bitter et coll. [5]. Cette cellule était cylindrique, de dimensions voisines de $1\text{ cm} \times 1\text{ cm}$. Le nombre d'atomes de mercure transférés dans la cellule, était, suivant notre estimation, de l'ordre de $10^{13} - 10^{14}$. La méthode de préparation utilisée donne pour le mercure obtenu la composition suivante :

$^{197}\text{Hg}^*$ 17 % ; ^{197}Hg 54 % ; ^{196}Hg 17 % ; ^{198}Hg 12 %.

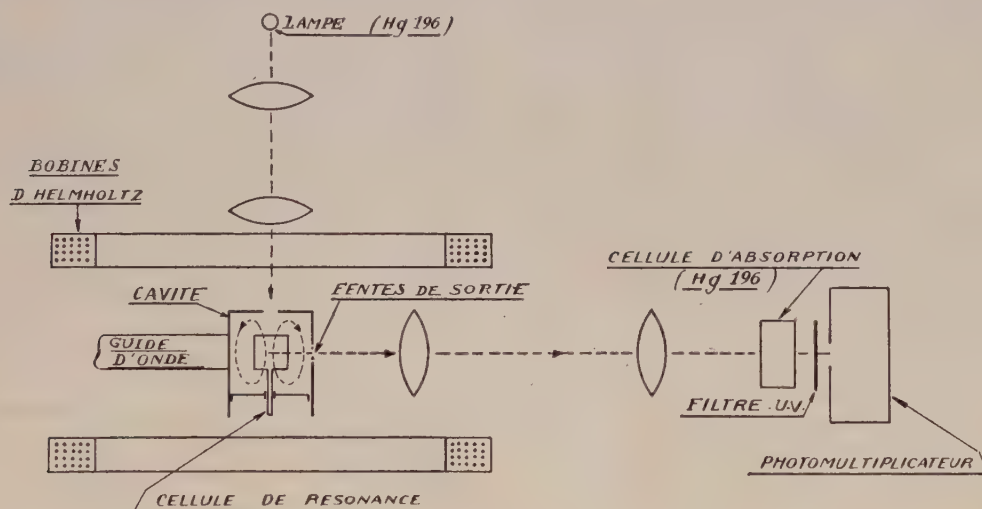


FIG. 2.

Montage de mesure. — Le montage expérimental est schématisé sur la figure 2. La source lumineuse est constituée par une lampe sans électrode remplie d'un mélange de différents isotopes du mercure (fourni par Oak Ridge National Laboratory), enrichi à 8,4 % de ^{196}Hg . La lampe est excitée par un magnétron fournissant 100 watts stabilisés vers 3 000 Mcs. La lumière de la lampe est focalisée par un système de lentilles de quartz sur la cellule de résonance contenant l'échantillon. Celle-ci est placée au centre d'une cavité électromagnétique cylindrique percée suivant son axe d'un trou pour l'illumination. Des fentes de sorties de la lumière sont ménagées sur la paroi latérale de la cavité, parallèlement à ses bases. La cavité résonne dans

un mode TE pour lequel, au centre, le champ magnétique est axial et maximum. Elle est accordable grâce à un piston constituant l'une de ses bases.

Son Q est de l'ordre de 6 000. Elle est alimentée par un klystron VA 92 C (délivrant à peu près 200 mw) par l'intermédiaire d'une ligne en guide d'onde (standard KU) comportant les organes de réglage habituels. Le champ magnétique hyperfréquence au centre de la cavité est, à puissance maximum, de l'ordre de 1 gauss. La lumière diffusée perpendiculairement par la cellule est focalisée à travers les fentes de la cavité sur un photomultiplicateur IP 28, avec interposition de la cellule d'absorption contenant elle aussi le mélange enrichi à 8,4 % de Hg 196. De plus un filtre inter-

férométrique UV, absorbant le visible, contribue à améliorer le rapport signal/bruit.

L'énergie hyperfréquence est modulée en amplitude par un atténuateur à lame semi-circulaire tournant dans une section de guide fendu. Cet atténuateur est actionné par un moteur synchrone alimenté par le secteur. La modulation s'effectue ainsi à 30 Hz. A la sortie du photomultiplicateur la composante à 30 Hz est extraite par un amplificateur sélectif et détectée dans un détecteur de phase (lock in) avec une bande passante de 0,2 Hz.

La fréquence exacte du klystron est mesurée par battement dans un cristal avec l'harmonique convenable d'un fréquencesmètre Guertsch FM 4 A lui-même accroché à un générateur à quartz Guertsch FM 6. L'oscillateur BF de celui-ci est lui-même étalonné par un fréquencesmètre comp-teur Hewlett-Packard. La précision ultime de cet ensemble est de l'ordre de 10^{-7} . Il a montré que l'instabilité à court terme du klystron était de l'ordre de 35 kHz.

Pour la commodité de la mesure le montage est complété par un balayage en champ magnétique faible permettant de mettre en évidence l'effet Zeeman sur la transition hyperfine (cf. § suivant). Pour ce faire une paire de bobines d'Helmoltz est montée autour de la cavité de mesure, avec leur axe parallèle à la direction de la lumière incidente et au champ magnétique hyperfréquence. Ces bobines sont alimentées par une grosse batterie d'accumulateurs à travers un rhéostat dont le curseur est mû par un moteur électrique. Le champ magnétostatique varie ainsi de 0 à 50 gauss en une dizaine de minutes. Le courant dans les bobines est mesuré par une résistance étalon dont la différence de potentiel aux bornes est appliqué à l'entrée X d'un enregistreur XY présentant une bonne linéarité. Le signal de double résonance, prélevé à la sortie du détecteur de phase, est appliqué à l'entrée Y de cet enregistreur. La différence de potentiel aux bornes de la résistance étalon est aussi mesurée sur un potentiomètre Rubicon : lorsque ce potentiel passe par une valeur prédéterminée, l'opérateur envoie un top de marquage sur l'enregistreur XY, ce qui permet ensuite l'étalonnage des abscisses dans les enregistrements obtenus.

Pour chaque valeur de la fréquence du klystron on prenait quatre enregistrements en inversant et le sens du courant dans les bobines (pour éliminer l'influence du champ terrestre), et le sens de parcours du balayage (pour annuler l'effet de la constante de temps du détecteur de phase).

Résultats. — a) MESURE EN CHAMP NUL. — Après avoir décelé la résonance autour de 14 235 MHz, nous avons relevé l'intensité du signal en fonction de la fréquence ; pour cela nous faisons varier point par point la fréquence du klystron en retou-

chant à chaque fois l'accord de la cavité. Il fallait prendre soin évidemment de travailler à niveau de puissance constant, en réglant le klystron au milieu de son mode et en agissant au besoin sur un atténuateur. La courbe de résonance obtenue a une largeur voisine de la largeur naturelle de l'état 3P_1 . Son maximum f_0 pouvait être pointé à 0,2 Mcs près.

b) MESURE EN CHAMP MAGNÉTIQUE FAIBLE. — Les 14 sous-niveaux Zeeman du niveau $F = 13/2$, et les 12 sous-niveaux Zeeman du niveau $F = 11/2$ sont sensiblement linéaires en champ pour les champs utilisés.

Les transitions $\Delta F = 1$ étaient, dans notre expérience, du type $\Delta m_F = 0$, du fait que, dans le volume de l'échantillon (au centre de la cavité) le champ magnétique hyperfréquence était sensiblement parallèle au champ statique. On a donc (fig. 3) à champ fixe 12 fréquences de transition ($m_F = -13/2 \dots +13/2$). Lorsqu'à fréquence fixe on balaie le champ magnétique, il apparaît 6 résonances qui se séparent ou non suivant que la fréquence f utilisée est éloignée ou non de f_0 .

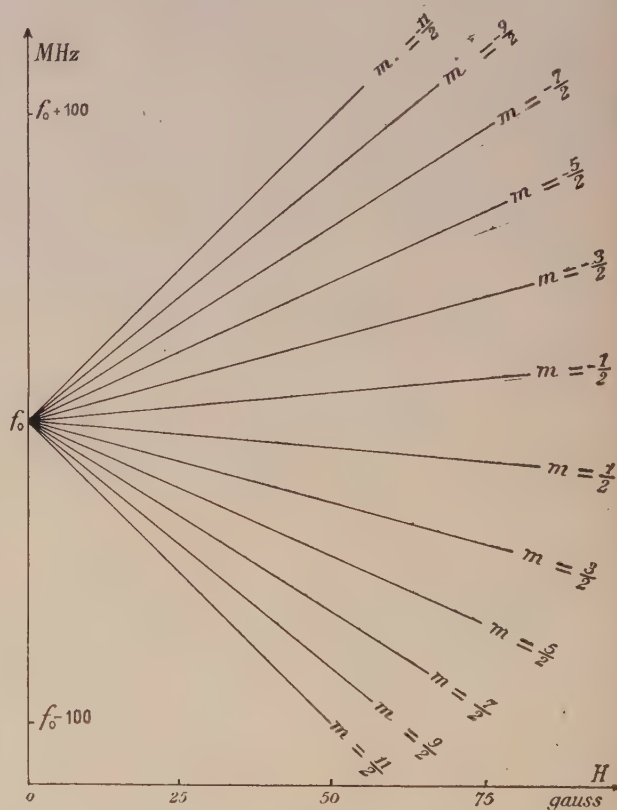


FIG. 3.

Pour faciliter l'identification rapide des raies enregistrées au cours d'une expérience nécessairement de courte durée, nous avons précalculé théoriquement, pour quelques valeurs de $f - f_0$, le

spectre attendu, c'est-à-dire la courbe théorique du signal en fonction du champ. L'Hamiltonien de l'atome dans le champ \mathcal{H} s'écrit avec les notations usuelles :

$$\mathcal{H} = A\mathbf{I} \cdot \mathbf{J} + BQ_{op} + g_J \mu_B \mathbf{J} \cdot \mathbf{H} + \frac{\mu_{197}}{I} \mathbf{I} \cdot \mathbf{H}. \quad (1)$$

Les éléments de matrice de cet opérateur sont bien connus [6]. Dans la représentation $|IJFm_F\rangle$, en négligeant pour l'instant la faible perturbation due aux éléments non diagonaux, l'énergie des sous-niveaux m est proportionnelle au champ. On obtient bien alors, par soustraction, pour la position des raies le diagramme linéaire et symétrique par rapport à f_0 tracé sur la figure 3 ; nous avons pour ce calcul adopté les valeurs numériques suivantes [2], les énergies étant exprimées par les fréquences correspondantes :

$$\mu_B = 1,399686 \text{ MHz/gauss}$$

$$g_J = 1,4861 \text{ (au lieu de 1,5 si le couplage était pur Russell-Saunders)}$$

$$\mu_{197}^* = -1,03 \text{ magnétons nucléaires.}$$

Pour calculer la forme d'un spectre il faut de plus faire intervenir la largeur des raies et calculer l'intensité relative de chaque raie. Celle-ci s'obtient de la manière suivante : on calcule d'abord le peuplement relatif de chacun des sous-niveaux m de 3P_1 , $F = 13/2$ produit par l'excitation lumineuse ; la lumière utilisée est sensiblement « blanche » dans le faible intervalle de la structure Zeeman, qui est très inférieur à sa largeur Doppler ; sa polarisation est $\sigma^+ + \sigma^-$. Les probabilités de transition optique (transition du dipôle électrique P) correspondantes sont données par $|\langle \alpha F m | P | \alpha' F m \pm 1 \rangle|^2 \propto \alpha$ et α' symbolisant les états électrique 1S_0 et 3P_1 respectivement, F étant le même ($13/2$) dans les deux états. En explicitant ces éléments de matrice [6] on trouve que les probabilités de transition $\sigma^+ + \sigma^-$ et finalement les populations des sous-niveaux m sont proportionnelles à $F(F+1) - m^2$.

Les probabilités de transitions magnétiques de radiofréquence vers chacun des sous-niveaux m_F de $F = 11/2$ sont, en tenant compte de la restriction expérimentale $\Delta m = 0$, proportionnelles à $|\langle F, m | J | F - 1, m \rangle|^2$ c'est-à-dire à $F^2 - m^2$ [6]. Nous avons donc pris pour intensité relative de chaque raie du spectre

$$J_{0,m} = [F(F+1) - m^2] (F^2 - m^2)$$

et calculé le spectre en admettant pour chaque raie une forme Lorentzienne en fréquence et une largeur égale à 2,3 MHz voisine de la largeur naturelle : l'intensité du signal en fonction du champ H est proportionnel à

$$J = \sum_{m=-11/2}^{m=+11/2} \frac{J_{0,m}}{1 + 4 \left(\frac{\Delta f - p_m H}{2,3} \right)^2} \quad \text{où } \Delta f = f - f_0$$

et où les p_m sont les pentes des droites de la figure 3 (MHz/gauss). Nous avons calculé ces fonctions pour trois valeurs de Δf . Celle correspondant à $\Delta f = 30 \text{ MHz}$ est représentée sur la figure 4a.

Les enregistrements expérimentaux étaient en bon accord avec les spectres théoriques. La figure 4b en donne un exemple.

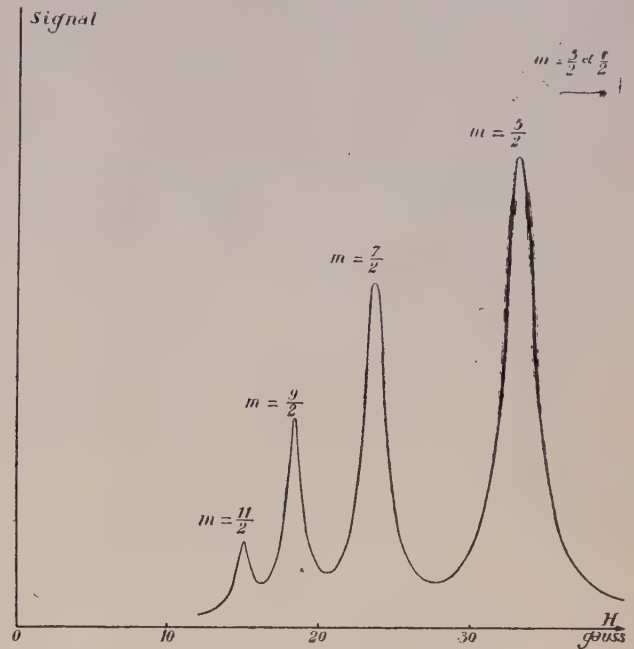


FIG. 4a.



FIG. 4b.

Le rapport signal-bruit, de l'ordre de 20, est très inférieur à celui obtenu par Kohler [3] pour ^{201}Hg par la même méthode. Ceci n'est guère surprenant étant donné le nombre beaucoup plus faible d'atomes de l'échantillon qui participent à la double résonance, et les conditions d'excitation optique sélective bien moins favorables (8,4 % seu-

lement de mercure utile dans la lampe). Malgré cela la mesure avec balayage magnétique reste légèrement plus précise que la mesure en champ nul, car dans cette dernière on ne peut être tout à fait certain que le changement de la fréquence du klystron et de l'accord de la cavité n'influe pas un peu sur le niveau HF dans celle-ci.

Nous avons pris des enregistrements tels que celui de la figure 4b à des fréquences différant de f_0 de ± 10 , ± 20 et ± 30 MHz à peu près. Pour chacune de ces fréquences nous avons pointé, par interpolation, pour celles des raies qui apparaissent bien séparées, le voltage V correspondant aux bornes de la résistance étalon, puis pris la moyenne $V_m(f)$ entre les 4 enregistrements correspondant à cette fréquence. Si les positions des raies étaient exactement linéaires en champ, il suffirait, pour une raie donnée à différentes fréquences, d'extrapoler linéairement vers $V_m = 0$ pour obtenir f_0 . En fait même aux champs faibles utilisés, il est nécessaire d'introduire, pour le calcul définitif de f_0 , les termes en H^2 dans les formules donnant les positions des raies en fonction du champ. Ces termes s'obtiennent en diagonalisant l'Hamiltonien de l'atome par un calcul de perturbation. Leurs coefficients sont de l'ordre de 10^{-4} MHz/gauss². Un étalonnage relativement grossier de V en fonction de H permettait de calculer ces termes avec une précision suffisante, étant donnée leur petitesse. Après soustraction de ces termes correctifs, nous avons calculé f_0 par extrapolation linéaire à partir de différentes raies m_F .

c) RÉSULTATS. — Les deux méthodes a) et b) concordent pour donner

$$f_0 = W_{F=13/2 \rightarrow F=11/2} = 14\,234,86 \pm 0,09 \text{ MHz.}$$

Il aurait été intéressant de mesurer avec la même précision le deuxième intervalle hyperfin,

$$F = 13/2 \rightarrow F = 15/2$$

vers 18 250 MHz. L'auteur et H. H. Stroke ont récemment tenté, sans succès, de déceler cette transition en utilisant le même montage alimenté cette fois par un klystron V 40 B. Cet échec était probablement dû : à la puissance insuffisante de ce klys-

tron ; aux conditions très défavorables dans lesquelles était utilisée la cellule d'absorption : contenant, outre ^{196}Hg , plusieurs isotopes stables, elle absorbait beaucoup trop la raie $15/2$ réémise (fig. 1). Nous avons essayé également, sans plus de succès, de faire la transition dans le sens

$$F = 15/2 \rightarrow F = 13/2$$

en illuminant le niveau $F = 15/2$ avec une lampe contenant un mélange ^{202}Hg , ^{204}Hg sous pression de gaz inerte.

En combinant notre résultat ci-dessus avec ceux de Hirsch, on calcule pour $^{197}\text{Hg}^*$:

$$F = 13/2 \rightarrow F = 15/2 = 18\,248 \pm 11 \text{ MHz}$$

$$A = -2\,328,89 \pm 0,84 \text{ MHz}$$

$$B = -902,9 \pm 5,4 \text{ MHz.}$$

Il est inutile, pour calculer le moment nucléaire à partir de A , de connaître exactement la fonction d'onde électronique de 3P_1 : On peut obtenir μ_{197}^* par comparaison avec un autre isotope du mercure dont le moment a été mesuré directement, comme ^{199}Hg [7] :

$$\frac{\mu_{197}^*}{\mu_{199}} \simeq \frac{I_{197}^* A_{197}^*}{I_{199} A_{199}}$$

A_{199} étant connu [8], on obtient

$$\mu_{197}^* = -1,0316 \pm 0,008$$

magnétons nucléaires. Ceci suppose évidemment que l'anomalie de la structure hyperfine soit négligeable devant l'erreur probable sur A , ce qui est le cas présentement. Cette anomalie hyperfine, qui reflète la répartition du magnétisme nucléaire, aurait d'ailleurs été très intéressante à connaître dans un noyau de spin élevé comme celui qui nous intéresse. Malheureusement il aurait fallu obtenir A avec une précision supérieure, c'est-à-dire qu'il aurait fallu connaître le deuxième intervalle hyperfin avec la même précision que le premier.

L'auteur tient à remercier le P^r F. Bitter qui l'a accueilli dans son laboratoire et a dirigé son travail ainsi que le D^r H. Stroke qui l'a constamment aidé de ses conseils.

Manuscrit reçu le 22 février 1961.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] MELISSINOS (A. C.) et DAVIS (S. P.), *Phys. Rev.*, 1959, **115**, 130.
- [2] HIRSCH (H. R.), Communication privée et *Thèse M. I. T.*, 1960.
- [3] KOHLER (R. H.), Quarterly Progress Reports, Research Laboratory of Electronics, M. I. T. : juillet 1956, p. 21 ; janvier 1958, p. 39 ; octobre 1959, p. 65 ; janvier 1960, p. 91. *Phys. Rev.*, 1961, **121**, 1104.
- [4] BROSSEL (J.) et KASTLER (A.), *C. R. Acad. Sc.*, 1949, **229**, 1213.
- [5] BROSSEL (J.) et BITTER (F.), *Phys. Rev.*, 1952, **86**, 308.
- [6] CONDON (E. U.) et SHORTLEY (G.), *The Theory of Atomic Spectra*, Cambridge University Press, 1953.
- [7] CAGNAC (B.) et BROSSEL (J.), *C. R. Acad. Sc.*, 1959, **249**, 77.
- [8] STAGER (C. V.), Communication privée et *Thèse M. I. T.* 1960.

DÉTERMINATION SPECTROSCOPIQUE DU SPIN DE ^{176}Lu ET DES MOMENTS NUCLÉAIRES MAGNÉTIQUE ET QUADRUPOLAIRE DE ^{175}Lu ET ^{176}Lu

Par JEAN BLAISE, JACQUES BAUCHE, SIMON GERSTENKORN (*)

et

FRANK S. TOMKINS (**),

Laboratoire Aimé-Cotton, C. N. R. S., Bellevue (Seine-et-Oise).

Résumé. — Les structures hyperfines de raies de Lu *I* et de Lu *II* émises par un échantillon de lutécium contenant 74,5 % de ^{176}Lu et 25,5 % de ^{175}Lu ont été enregistrées avec un spectromètre Fabry-Perot. Du rapport des intensités des composantes hyperfines, on a déduit que $I^{176} = 7$, ce qui confirme le résultat de Kaliteevsky et Tchaika. Les rapports des moments des deux isotopes sont :

$$\mu^{175}/\mu^{176} = 0.7109 \pm 0.0050 \quad \text{et} \quad Q^{175}/Q^{176} = 0.71 \pm 0.01.$$

La valeur proposée par Steudel, $\mu = +2.0 \pm 0.2 \mu_N$ est confirmée, mais la valeur du moment quadrupolaire doit être révisée :

$$Q^{175} = (4.0 \pm 0.5) \cdot A / (1 - R) \cdot 10^{-24} = (5.6 \pm 0.6) \cdot A / (1 - R') \cdot 10^{-24} \text{ cm}^2,$$

où R et R' sont les corrections de Sternheimer pour les électrons $6p$ et $5d$.

Les résultats sont comparés aux prévisions du modèle de Mottelson et Nilsson, et le rapport des moments quadrupolaires indique que les déformations des deux noyaux sont identiques.

Abstract. — The hyperfine structure of several lines of Lu *I* and Lu *II*, emitted by a sample of lutetium containing 74.5 % ^{176}Lu and 25.5 % ^{175}Lu , have been recorded using a Fabry-Perot spectrometer. From the ratio of intensities of the hyperfine structure components, it is deduced that $I^{176} = 7$, confirming the result of Kaliteevskii and Chaika. The ratios of the moments of the two isotopes are :

$$\mu^{175}/\mu^{176} = 0.7109 \pm 0.0050 \quad \text{and} \quad Q^{175}/Q^{176} = 0.71 \pm 0.01.$$

The value proposed by Steudel, $\mu = +2.0 \pm 0.2 \mu_N$ is confirmed, but the value of the quadrupole moment must be revised :

$$Q^{175} = (4.0 \pm 0.5) \cdot A / (1 - R) \cdot 10^{-24} = (5.6 \pm 0.6) \cdot A / (1 - R') \cdot 10^{-24} \text{ cm}^2,$$

where R and R' are the Sternheimer corrections for the $6p$ and $5d$ electrons, respectively. The results are compared with the predictions of the model of Mottelson and Nilsson, the ratios of the quadrupole moments indicating that the deformations of the two nuclei are identical.

I. Introduction. — Schüller et Gollnow [1], en 1939, ont étudié à l'aide d'un interféromètre Fabry-Perot la structure hyperfine des raies 6 463 Å

$$(5d6s \ ^3D_1 - 6s6p \ ^3P_0^o)$$

et 5 984 Å

$$(5d6s \ ^3D_1 - 6s6p \ ^3P_1^o)$$

du Lu *II*. Ils ne disposaient que de lutécium naturel contenant seulement 2,6 % de ^{176}Lu et les intensités des composantes hyperfines étaient déduites d'enregistrements effectués sur plaque photographique. Ils ont pu néanmoins établir que le spin de ^{176}Lu était supérieur ou égal à 7 et inférieur à 20, que son moment magnétique μ était à peu près indépendant de la valeur choisie pour le spin et égal à $+3,8 \pm 0,7 \mu_N$ et que son moment quadrupolaire Q décroissait de $+8.0$ à $+6.0 \cdot 10^{-24} \text{ cm}^2$, suivant qu'ils adoptaient pour le spin les valeurs 7 ou 13.

En 1957, Steudel [2] a repris l'étude de la structure hyperfine de raies de Lu *I* et Lu *II*, mais cette fois à l'aide du spectromètre Fabry-Perot photo-électrique [3]. De cette étude faite aussi avec du lutécium naturel, il a conclu que la valeur la plus probable du spin était 6, les valeurs 5 et 7 n'étant pas exclues. Il recalcule les moments nucléaires de ^{175}Lu :

$$\mu^{175} = 2,0 \pm 0,2 \mu_N$$

et

$$Q^{175} = (5,6 \pm 0,6) \cdot 10^{-24} \text{ cm}^2$$

et à partir des rapports mesurés des moments des deux isotopes, il conclut que, pour

$$I^{176} = 6, \quad \mu^{176} = 2,8 \pm 0,3 \mu_N$$

et

$$Q^{176} = (8 \pm 1) \cdot 10^{-24} \text{ cm}^2.$$

Disposant d'un échantillon de Lu_2O_3 contenant 30 % de ^{176}Lu , Kaliteevsky et Tchaika [4] ont refait en 1959 l'expérience de Schüller et Gollnow

(*) Ingénieur au Centre d'Études Nucléaires de Saclay.

(**) Guggenheim Fellow (1960-1961), adresse permanente : Argonne National Laboratory, Argonne, Illinois.

sur la raie 6 463 Å avec la même épaisseur d'étalon, mais en utilisant un spectromètre Fabry-Perot photoélectrique. La mesure du rapport des intensités des deux composantes extrêmes de la structure hyperfine de ^{176}Lu leur permet de conclure que la valeur du spin de cet isotope était 7, tout en précisant que « il serait souhaitable d'effectuer des mesures sur d'autres raies du lutécium pour éliminer complètement les valeurs du spin différentes de 7 ».

L'un d'entre nous ayant obtenu d'Oak Ridge un échantillon de Lu_2O_3 contenant 74,5 % de ^{176}Lu et 25,5 % de ^{175}Lu , il devait être facile de réaliser ce souhait.

II. Dispositif expérimental. — *a) SOURCE DE LUMIÈRE.* — Nous avons utilisé une cathode creuse refroidie à l'azote liquide. Le gaz porteur était du néon et l'intensité du courant a varié de 10 à 50 mA, selon la raie étudiée. La quantité totale d'oxyde de lutécium introduite dans la lampe a été d'environ 6 mg.

b) SPECTROMÈTRE FABRY-PEROT PHOTOÉLECTRIQUE ENREGISTREUR. — Ce type d'appareil, en service au Laboratoire depuis 1948, a été décrit à plusieurs reprises [3], [5]. Le modèle utilisé comportait un monochromateur à réseau du type Ebert-Fastie, un étalon Fabry-Perot à sept couches ZnS-cryolithe et un photomultiplicateur EMI du type 9 558 B, sensible dans le rouge, couplé à un potentiomètre électronique du type Speedomax. On a exploré les anneaux d'interférence en laissant rentrer l'air dans la cloche de l'étalon, vidée au préalable, à l'aide d'un robinet à pointe à réglage fin. Cette manière d'opérer complice un peu la mesure des positions des composantes de structure hyperfine sur les enregistrements, car le temps mis pour explorer un ordre d'interférence augmente régulièrement par suite de la diminution de la différence de pression entre la cloche de l'étalon et l'atmosphère, mais elle laisse inchangée la hauteur des composantes et ne gêne donc en rien les mesures d'intensité dont dépend la détermination du spin.

III. Détermination du spin de ^{176}Lu . — Comme l'ont déjà remarqué nos prédécesseurs, en raison de la valeur élevée prévue pour le spin et pour le moment quadrupolaire, il est impossible de déterminer le spin par application de la règle de Landé aux intervalles hyperfins ou d'après la multiplicité des termes hyperfins, cette dernière étant toujours limitée par la faible valeur de J dans les spectres du lutécium. La seule ressource est donc de mesurer les intensités relatives des composantes hyperfines. Cette méthode conduit à un résultat sûr quand le rapport théorique des intensités de deux composantes varie suffisamment avec le spin pour que, malgré les inévitables erreurs, le rapport mesuré ne donne qu'une solution. Ayant l'avantage de dis-

poser d'un échantillon considérablement enrichi en ^{176}Lu , il nous était facile de limiter nos mesures d'intensité à des composantes choisies d'après le critère précédent, parfaitement résolues et assez intenses pour réduire l'incertitude sur le fond provenant des composantes voisines. Il fallait en outre s'assurer au préalable que le spectromètre Fabry-Perot permettait d'enregistrer correctement les intensités de composantes hyperfines.

a) VÉRIFICATION DES INTENSITÉS DES COMPOSANTES HYPERFINES FOURNIES PAR LE SPECTROMÈTRE. — Dans notre montage, l'étalon Fabry-Perot se trouve à la sortie du monochromateur. Si les fentes d'entrée et de sortie de ce dernier sont prises égales, sa fonction d'appareil est triangulaire.

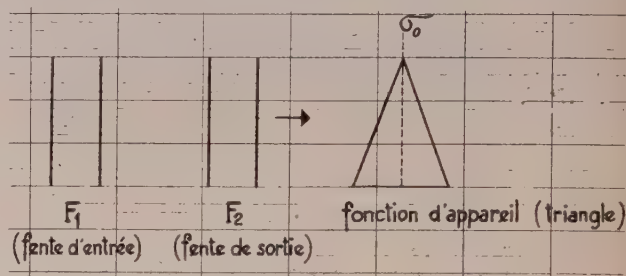


FIG. 1.

laire (fig. 1). Le flux lumineux transmis au Fabry-Perot n'est maximum que pour la radiation σ_0 sur laquelle est réglé le monochromateur. Il en résulte que pour mesurer l'intensité de radiations $\sigma_1, \sigma_2 \dots$ voisines de σ_0 , il faut effectuer un balayage synchrone du monochromateur et de l'étalon. Le balayage synchrone peut être réalisé de plusieurs manières [6], mais nous avons préféré adopter une solution très simple, bien qu'entraînant une légère perte de luminosité. Les fentes d'entrée et de sortie du monochromateur sont prises inégales, ce qui conduit à une fonction d'appareil trapézoïdale

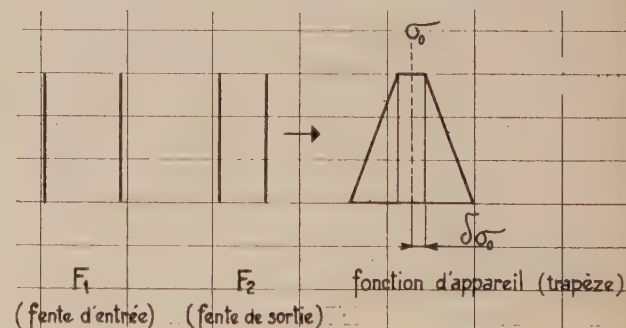


FIG. 2.

(fig. 2) : toutes les radiations comprises dans le domaine $\sigma_0 \pm \delta\sigma_0$ sont correctement transmises par le monochromateur à l'étalon. La figure 3 repré-

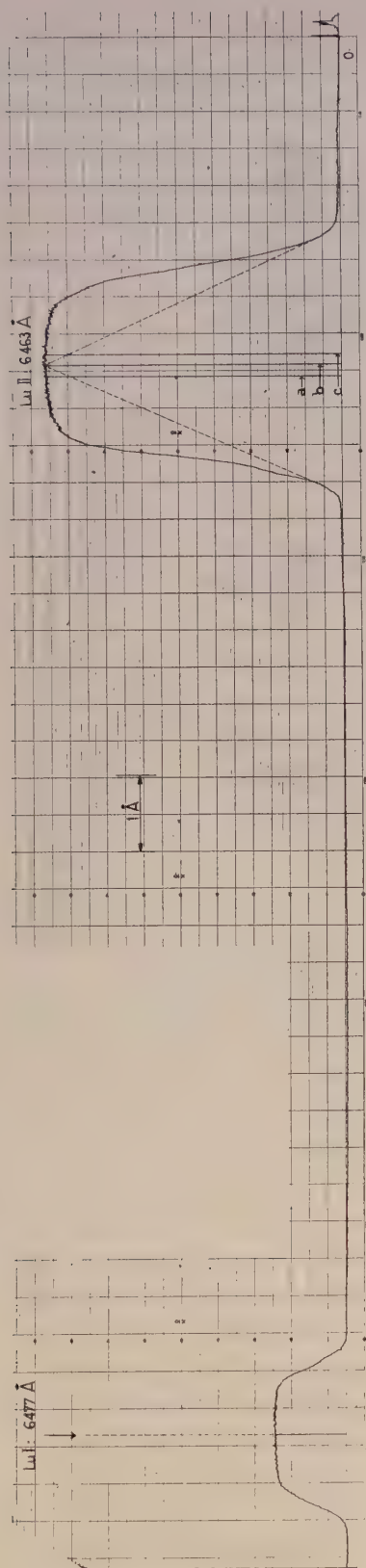


FIG. 3. — Enregistrement de la fonction d'appareil du monochromateur :
a, b et c représentent les positions des composantes hyperfines de la raie λ 6 463 Å.

sente un enregistrement de la fonction d'appareil du monochromateur seul pour les raies 6 463 Å de Lu II et 6 477 Å de Lu I, réalisé, avec du lutécium naturel, en faisant tourner le réseau. On a indiqué en pointillé la fonction triangulaire qui aurait été obtenue avec des fentes égales : on constate que l'emploi d'une fonction trapézoïdale est nécessaire si l'on ne veut pas fausser les rapports d'intensité entre composantes de la structure de la raie 6 463 Å.

Pour nous assurer que nous ne commettons pas d'erreurs systématiques, nous avons enregistré les raies 6 463 Å de Lu II et 4 905 Å de Lu I avec du lutécium naturel (97,40 % de ^{175}Lu) dont le spin est 7/2 et nous avons vérifié que les rapports d'intensité mesurés pour différents couples de composantes hyperfines étaient bien les rapports théoriques (fig. 4a et 5a).

b) MESURE DU SPIN DE ^{176}Lu . — En substituant l'échantillon enrichi en ^{176}Lu au lutécium naturel, les mêmes raies ont été enregistrées dans les mêmes conditions (mêmes étalons, mêmes distances entre les lames). Les figures 4b et 5b montrent des enregistrements types. Nous avons conservé la désignation des composantes adoptée par Steudel [2] : a, b, c, ... pour les composantes de ^{175}Lu , a', b', c', ... pour les composantes correspondantes de ^{176}Lu et les figures 4c, 4d, 5c et 5d montrent la structure des raies et les schémas de niveaux hyperfins correspondants. Au début et à la fin de chaque expérience, nous avons eu soin d'enregistrer le courant d'obscurité (zéro de l'enregistrement). Les corrections de fond et de pieds ont été soigneusement effectuées, soit par symétrisation de profils purs, soit par le calcul, en tenant compte des différents paramètres (effet Doppler, fonction d'Airy) qui contribuent à la formation du profil enregistré [6], [8]. Ces corrections s'avèrent peu importantes, car nous avons choisi des couples de raies bien résolues, dont les intensités sont du même ordre de grandeur (les rapports mesurés varient de 1,3 à 2,6) et ces raies sont souvent perturbées de façon équivalente par les pieds des composantes correspondantes de ^{175}Lu . À titre d'exemple, pour la raie 4 905 Å, on trouve pour le rapport a'/b' les valeurs 1,49 sans corrections et 1,50 après corrections. Les résultats obtenus sont indiqués dans le tableau I où seul le dernier rapport mesuré nécessite la connaissance du rapport d'abondance des deux isotopes, $2,922 \pm 0,016$ déterminé au spectrographe de masse.

L'accord excellent entre les valeurs mesurées et les valeurs prévues théoriquement pour $I = 7$ nous conduit à confirmer la valeur obtenue par Kalitchevsky et Tchaika [4] sur la seule raie 6 463 Å.

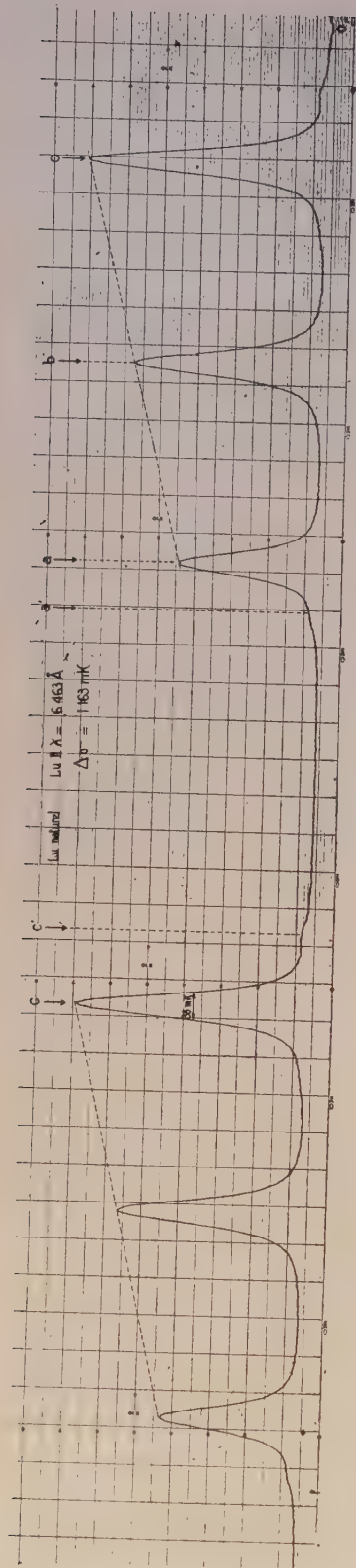


FIG. 4a.

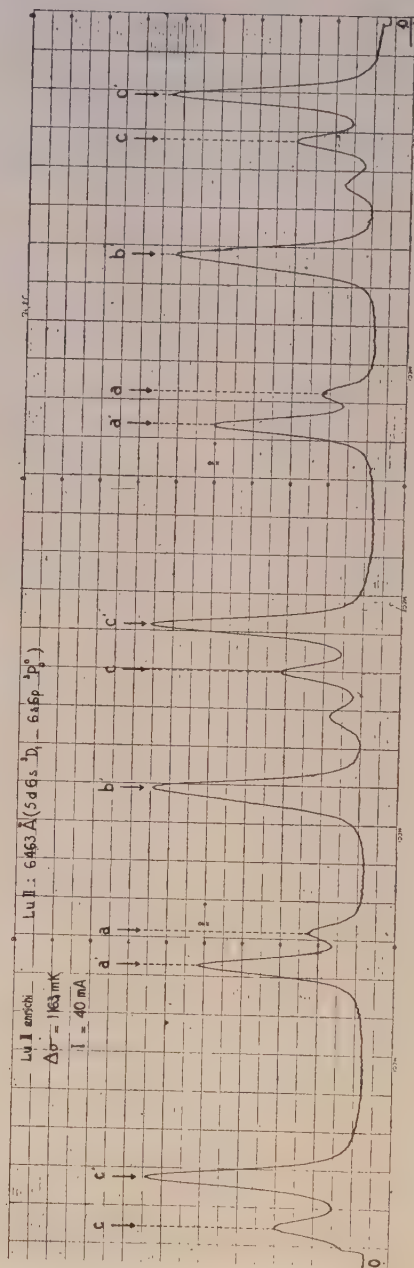


FIG. 4 b.

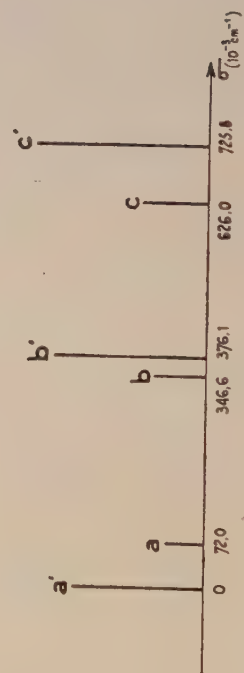


FIG. 4 c.

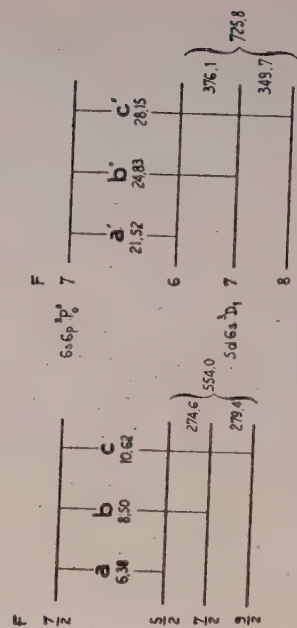


FIG. 4 d.

Fig. 4. — Enregistrement, structure et schéma de niveau de la raie 6 463 Å.

TABLEAU I

LONGUEUR D'ONDE (Å)	COMPOSANTES	I	RAPPORT D'INTENSITÉS	
			CALCULÉ	MESURÉ
6 463	$\frac{c'}{a'}$	6	1,364	1,32 ± 0,02
		7	1,308	
		8	1,267	
4 905	$\frac{a'}{f'}$	6	1,600	1,50 ± 0,02
		7	1,500	
		8	1,429	
	$\frac{a'}{b'}$	6	1,857	1,82 ± 0,02
		7	1,808	
		8	1,771	
	$\frac{a'}{a}$	6	2,615	2,57 ± 0,03
		7	2,550	
		8	2,500	

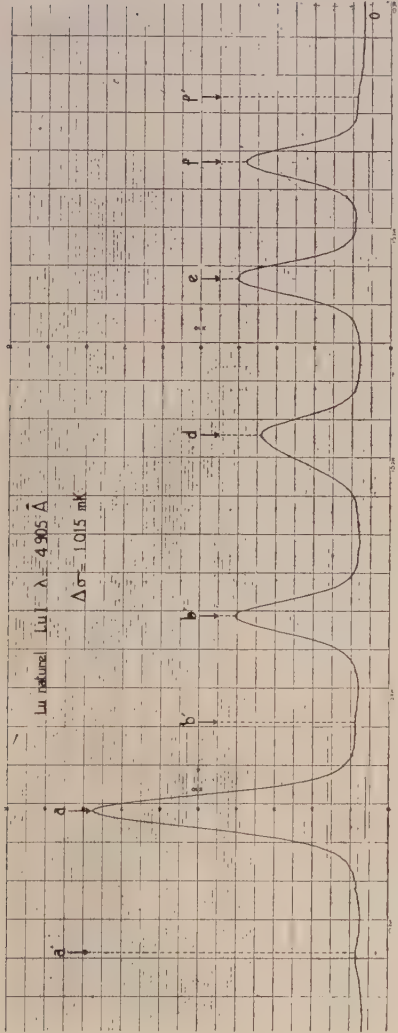


FIG. 5 a.

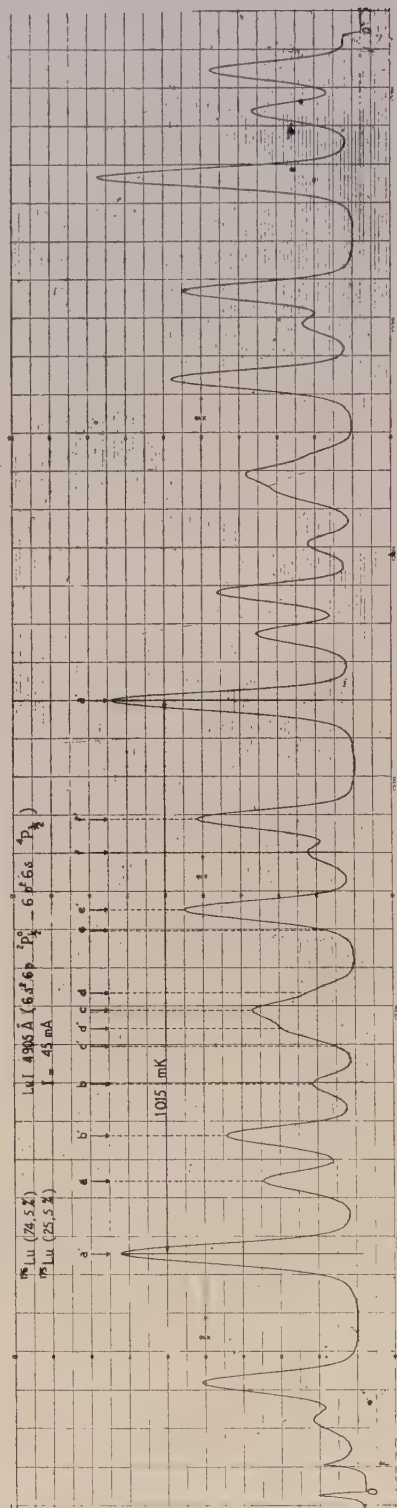


FIG. 5 b.

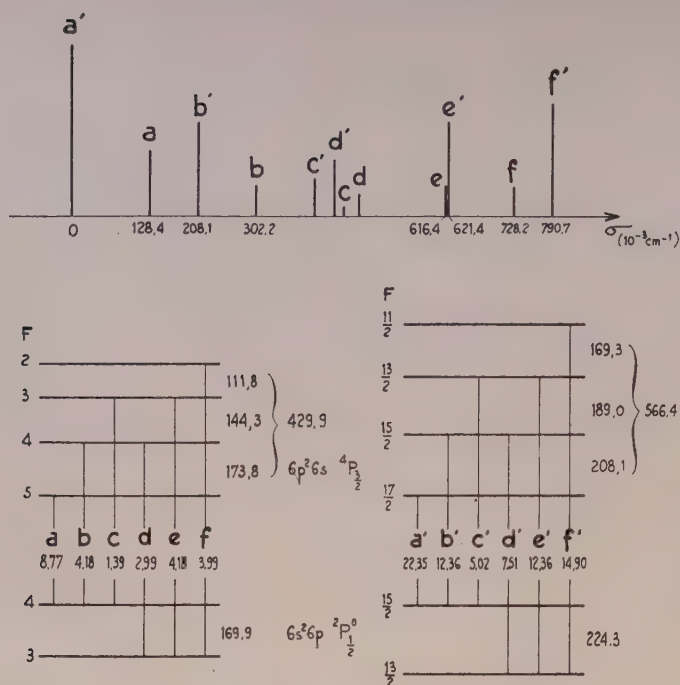


FIG. 5 c et d.

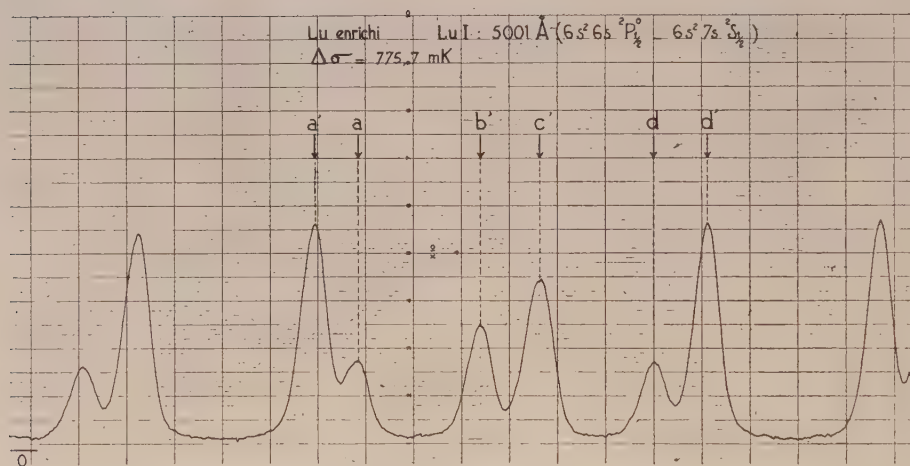


FIG. 6 a.

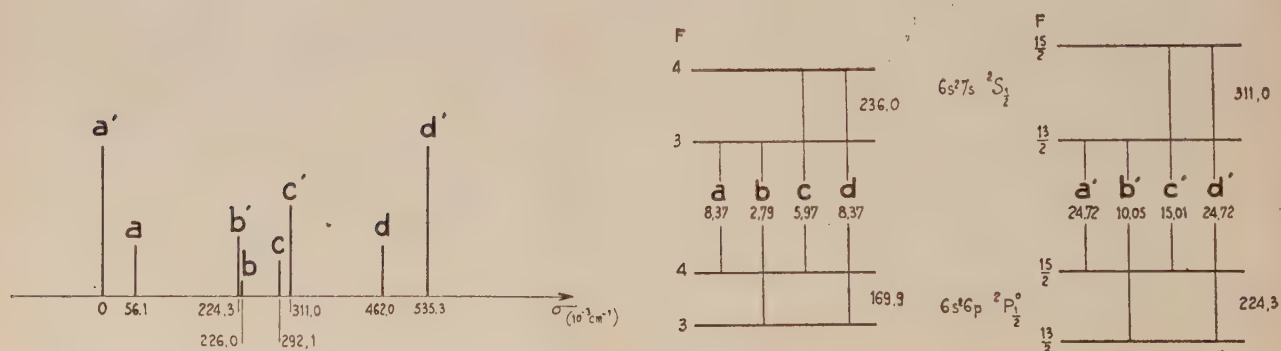


FIG. 6 b.

FIG. 6 c.

IV. Rapports des moments magnétiques et des moments quadrupolaires de ^{175}Lu et ^{176}Lu et vérification du spin de ^{176}Lu . — Outre les raies utilisées

pour la détermination du spin de ^{176}Lu , nous avons enregistré deux autres raies de Lu $I : 5\,001\text{ Å}$, déjà étudiée par Steudel [2] et $6\,004\text{ Å}$ (fig. 6 et 7).

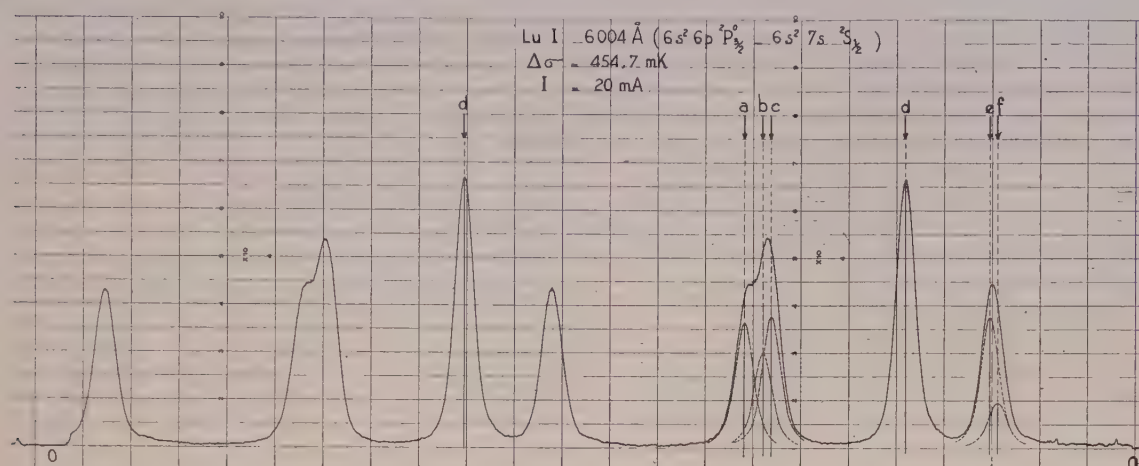


FIG. 7 a.

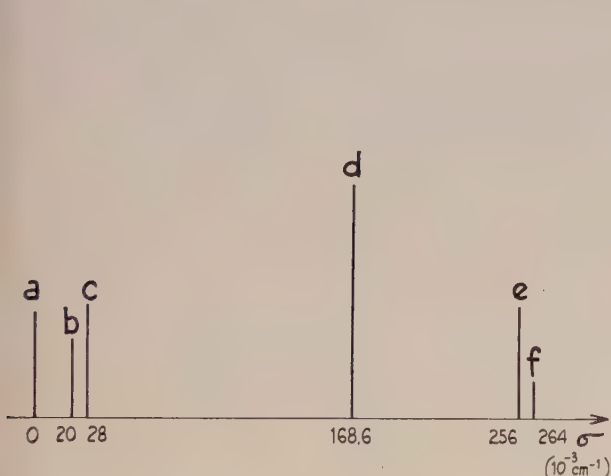


FIG. 7 b.

La raie $5\,001\text{ Å}$ ($6s^2\,6p\,^2P_{1/2}^0 - 6s^2\,7s\,^2S_{1/2}$) permet de calculer immédiatement le rapport des facteurs d'intervalles magnétiques A^{175}/A^{176} .

(Dans tout ce qui suit les notations utilisées sont celles de Kopfermann [7].)

On a en effet :

$$\frac{d - a}{d' - a'} = \frac{8}{15} \frac{A^{175}}{A^{176}}$$

D'où l'on tire :

$$A^{175}/A^{176} = 1,4217 \pm 0,0020.$$

Pour la raie $6\,004\text{ Å}$ ($6s^2\,6p\,^2P_{3/2}^0 - 6s^2\,7s\,^2S_{1/2}$), nous indiquons les résultats pour l'isotope 175 seulement, l'enregistrement fait avec le mélange enrichi étant difficile à interpréter en raison de la proximité des composantes a, b, c et a', b', c' d'une part et des composantes e, f et e', f' d'autre part.

TABLEAU II

SPECTRE	TERME	$^{175}\text{Lu} (I = 7/2)$		$^{176}\text{Lu} (I = 7)$	
		$A (10^{-3} \text{ cm}^{-1})$	$B (10^{-3} \text{ cm}^{-1})$	$A (10^{-3} \text{ cm}^{-1})$	$B (10^{-3} \text{ cm}^{-1})$
I	$6s^2\,6p\,^2P_{1/2}^0$	$42,48 \pm 0,08$	—	$29,91 \pm 0,08$	—
	$6s^2\,6p\,^2P_{3/2}^0$	$7,43 \pm 0,30$	$70,39 \pm 1,50$	—	—
	$6s^2\,7s\,^2S_{1/2}$	$59,00 \pm 0,10$	—	$41,47 \pm 0,10$	—
	$6p^2\,6s^4\,P_{3/2}$	$35,67 \pm 0,08$	$6,39 \pm 0,40$	$25,12 \pm 0,08$	$8,98 \pm 1,00$
II	$5d\,6s\,^3D_1$	$68,23 \pm 0,10$	$28,64 \pm 0,10$	$48,05 \pm 0,08$	$40,51 \pm 0,10$

Le tableau II indique les valeurs des facteurs d'intervalles magnétiques A et des facteurs de couplage quadrupolaire B déduites de nos mesures.

Il y a très bon accord avec les valeurs de Steudel pour l'isotope 175 et avec celles de Schüller et Gollnow pour le terme $5d6s\ ^3D_1$ pour les deux isotopes.

Dans le tableau III nous indiquons les valeurs des rapports A^{175}/A^{176} et B^{175}/B^{176} .

TABLEAU III

SPECTRE	TERME	A^{175}/A^{176}	B^{175}/B^{176}
I	$6s^2\ 6p\ ^2P_{1/2}^0$	$1,420 \pm 0,006$	
	$6s^2\ 7s\ ^2S_{1/2}$	$1,423 \pm 0,006$	
	$6p^2\ 6s\ ^4P_{3/2}$	$1,420 \pm 0,007$	$0,712 \pm 0,120$
II	$5d6s\ ^3D_1$	$1,420 \pm 0,004$	$0,707 \pm 0,007$
	Moyennes	$1,421 \pm 0,003$	$0,71 \pm 0,01$

Les valeurs de A^{175}/A^{176} pour les différents termes spectraux sont en accord avec la valeur $1,4217 \pm 0,0020$ calculée plus haut. En négligeant l'anomalie de structure hyperfine, ce qui peut introduire, d'après Steudel, une erreur supplémentaire de 0,5 %, on en déduit le rapport des moments

magnétiques des deux isotopes :

$$\frac{\mu^{175}}{\mu^{176}} = \frac{I^{175}}{I^{176}} \frac{A^{175}}{A^{176}} = 0,7109 \pm 0,0050.$$

Le fait que le spin de l'isotope 175 est passé de 6 à 7 n'a réduit la valeur calculée par Steudel que de 1/91.

Pour le rapport des moments quadrupolaires des deux isotopes, on a :

$$\frac{Q^{175}}{Q^{176}} = \frac{B^{175}}{B^{176}} = 0,71 \pm 0,01.$$

L'étude de la variation du rapport B^{175}/B^{176} en fonction de la valeur du spin choisi pour l'isotope 176 permet de vérifier la valeur déduite des mesures d'intensité. Ce procédé, déjà utilisé par Speck et Jenkins [9] dans le cas de l'hafnium a été appliqué aux trois termes spectraux avec un J supérieur à 1/2, dont la structure hyperfine a été mesurée pour les deux isotopes par Schüller et Gollnow, par Steudel ou par nous. On doit trouver une valeur de I^{176} pour laquelle la valeur de B^{175}/B^{176} est la même quel que soit le terme spectral considéré.

Le tableau IV indique les valeurs de B^{175}/B^{176} calculées à partir des structures observées en attribuant au spin de ^{176}Lu les valeurs 6, 7 et 8.

TABLEAU IV

RAPPORTS B^{175}/B^{176}

I^{176} TERME	SCHÜLER- GOLLNOW	$I = 6$		SCHÜLER- GOLLNOW	$I = 7$		SCHÜLER- GOLLNOW	$I = 8$	
		STEUDEL	BELLEVUE		STEUDEL	BELLEVUE		STEUDEL	BELLEVUE
$6p^2\ 6s\ ^4P_{3/2}$		0,45 $\pm 0,30$	0,447 $\pm 0,060$		0,697	0,712 $\pm 0,120$		1,30	1,39 $\pm 0,40$
$5d6s\ ^3D_1$	0,684	0,70 $\pm 0,03$	0,665 $\pm 0,010$	0,729	0,750	0,707 $\pm 0,010$	0,770	0,796	0,746 $\pm 0,010$
$6s\ 6p^3\ P_1^0$	0,688	0,70 $\pm 0,01$		0,743	0,760		0,795	0,817	

On voit que pour les termes 3D_1 et $^3P_1^0$, la variation de B^{175}/B^{176} en fonction du spin est lente et qu'il est impossible de choisir en raison de l'imprécision des mesures. Pour le terme $^4P_{3/2}$ par contre, la valeur du rapport varie très rapidement et bien que les erreurs de mesure possibles soient relativement grandes, il ressort clairement du tableau que c'est la valeur 7 qui donne les valeurs du rapport les plus voisines pour les trois termes. Nos mesures ayant confirmé l'interprétation de la structure hyperfine du terme $^4P_{3/2}$ donnée par Steudel, il convient de réduire l'incertitude dont il a affecté la valeur de B^{175}/B^{176} dans l'hypothèse $F = 6$ ($0,45 \pm 0,30$). A moins d'admettre que le terme $^4P_{3/2}$ d'une part, ou les termes 3D_1 et $^3P_1^0$ d'autre

part, soient soumis du fait de termes voisins à des perturbations telles que le calcul des facteurs A et B n'ait aucun sens, nous pouvons conclure sans ambiguïté à la valeur 7 pour le spin de l'isotope 176.

V. Moments magnétique et quadrupolaire de ^{175}Lu . — Depuis que Schüller et Schmidt [10] ont confirmé que les déviations de la règle d'intervalle de Landé observées dans les structures hyperfines du lutécium s'expliquaient comme dans le cas de l'euporium par l'existence d'un moment quadrupolaire, les moments magnétique et quadrupolaire de cet isotope ont été calculés à plusieurs reprises. Casimir [11] a utilisé les résultats expérimentaux de Schüller et Schmidt pour les termes $^3D_{1,2,3}$ et

³P_{1,2} de Lu II ; Gollnow [12] a repris ces calculs à partir des mêmes résultats expérimentaux auxquels il a ajouté le terme ²D_{5/2} de Lu I ; récemment, Steudel [2] a mesuré deux nouveaux termes spectraux et révisé les valeurs des données spectroscopiques entrant dans les formules de Goudsmit-Fermi-Segrè ; enfin le terme 6s² 6p ²P_{3/2}^o de Lu I

mesuré au cours de ce travail donne une nouvelle possibilité de calculer les moments.

a) MOMENT MAGNÉTIQUE. — Nous indiquons dans le tableau V les différentes façons dont le moment magnétique a été calculé par Gollnow, par Steudel et par nous-mêmes.

TABLEAU V

AUTEURS	TERME SPECTRAL	FACTEUR D'INTERVALLE (10 ⁻³ cm ⁻¹)	CONSTANTES UTILISÉES δW (cm ⁻¹)	μ ¹⁴⁵ VALEUR ADOPTÉE
GOLLNOW	Lu I 5d6s ² ² D _{5/2}	a _{d5/2} = 4,62	Z _i = 60 ; δW = 1 993,9	3,23
	Lu II 5d6s ³ D _{1,2,3}	$\left\{ \begin{array}{l} a_{d5/2} = 4,57 \\ a_s = 320 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} Z_i = 60 ; \delta W = 2\,403 \\ n_a^3/Z_a^2(dn_a/dn) = 2,20 \\ n_a^3/Z_a^2(dn_a/dn) = 2,79 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} 2,66 \\ 2,28 \\ 2,85 \end{array} \right. \pm 0,5$
	6s6p ³ P _{1,2}	$\left\{ \begin{array}{l} a_{p3/2} = 7,2 \\ a_s = 362 \end{array} \right.$	Z _i = 67 ; δW = 4 851,9	1,8
STEUDEL	Lu I 5d6s ² ² D _{3/2}	a _{d3/2} = 6,41	Z _i = 60 ; δW = 1 993,93	1,84
	² D _{5/2}	a _{d3/2} = 5,5		3,85
	6s ² 6p ² P _{1/2}	a _{p5/2} = 42,39	$\left\{ \begin{array}{l} Z_i = 65 ; \delta W = 3\,340,35 \\ 1 - \delta = 0,990 ; 1 - \varepsilon = 0,996 \end{array} \right.$	2,07
	Lu II 5s6d ³ D _{1,2,3}	$\left\{ \begin{array}{l} a_{d3/2} = 10,6 \\ a_s = 320 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} Z_i = 60 ; \delta W = 2\,440,35 \\ n_a^3/Z_a^2(dn_a/dn) = 1,80 \\ 1 - \delta = 0,938 ; 1 - \varepsilon = 0,983 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} 2,48 \\ 1,99 \end{array} \right. \pm 0,2$
BELLEVUE	66 s ³ P _{1,2}	$\left\{ \begin{array}{l} a_s = 362,1 \\ a_{p1/2} = 54,3 \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} Z_i = 65 ; \delta W = 4\,851,9 \\ 1 - \delta = 0,990 ; 1 - \varepsilon = 0,996 \end{array} \right.$	1,83
	Lu I 6s ² 6p	² P _{1/2} a _{p1/2} = 42,48	1 - δ = 0,990 ; 1 - ε = 0,996	2,08
		² P _{3/2} a _{p3/2} = 7,43	$\left\{ \begin{array}{l} Z_i = 65 ; \delta W = 3\,340,35 \\ \delta = \varepsilon = 0 \end{array} \right.$	2,65

On peut constater l'excellent accord entre les résultats expérimentaux des différents auteurs, à l'exception du terme 5d6s² ²D_{5/2} dont la structure est très difficile à mesurer.

Les facteurs d'intervalle des électrons a_{p1/2}, a_{p3/2}, a_{d3/2} et a_{d5/2} sont égaux aux facteurs d'intervalle A des termes dans le cas du spectre d'arc ; dans le cas des termes des configurations 5d6s et 6s6p de Lu II, ils se déterminent par la méthode du couplage intermédiaire de Breit et Wills [13] en supposant que le rapport a_{i-1/2}/a_{i+1/2} est égal au rapport théorique

$$\frac{l + 3/2}{l - 1/2} \cdot \frac{F_{\tau, l-1/2}}{F_{\tau, l+1/2}} \cdot \frac{[(1 - \delta)(1 - \varepsilon)]_{l-1/2}}{[(1 - \delta)(1 - \varepsilon)]_{l+1/2}}$$

où les corrections δ et ε sont respectivement égales à 0,010 et 0,004 pour l'électron p_{1/2} et négligeables dans les autres cas.

Cette condition n'est pas respectée dans le dou-

blet 6s² 6p ²P^o et encore moins dans 5d6s² ²D, où les facteurs d'intervalle ont été mesurés directement. Comme dans ces deux cas, le rapport mesuré est trop petit, il en résulte que les valeurs du moment magnétique déduites de a_{p1/2} ou a_{d3/2} sont probablement trop petites, la conclusion inverse étant vraie pour les valeurs déduites de a_{p3/2} et a_{d5/2} par la même formule.

Les deux termes de la configuration 6s6p ne permettent pas de vérifier la validité de la méthode de Breit et Wills. Par contre, à partir des termes ³D_{1,2,3} combinés deux à deux, Gollnow a calculé pour a_s les valeurs 313,4, 321,0 et 324,8 tandis que Steudel a trouvé 310,8, 318,9 et 322,9.10⁻³ cm⁻¹. On voit donc que le grand facteur d'intervalle a_s est peu sensible aux variations possibles des petits facteurs d'intervalle a_d, quelles qu'en soient les raisons et on est ainsi conduit à préférer la valeur du moment magnétique déduite de ce facteur d'intervalle. Sa

détermination exige en outre la connaissance de l'expression $n_a^3(6s)/Z_a^2(dn_a/dn)$ que Steudel a évalué à 1,80 par deux méthodes d'interpolation entre les spectres d'étincelle d'éléments voisins. Cette estimation est confirmée par la valeur 1,84 que nous avons déduite du schéma de niveaux de Lu II récemment publié par Bovey et Pearse [14], en supposant que le potentiel d'ionisation de ce spectre est $115\,000\text{ cm}^{-1}$. Nous concluons donc, comme Steudel, que la valeur la plus probable du moment magnétique de l'isotope 175 est

$$+ 2,0 \pm 0,2 \mu_N$$

et celle de l'isotope 176,

$$+ 2,8 \pm 0,3 \mu_N.$$

b) MOMENT QUADRUPOLAIRE. — Les différentes déterminations du moment quadrupolaire Q^{175} ne sont pas plus concordantes. Dans le tableau VI, nous comparons les valeurs déduites des divers termes spectraux par les mêmes auteurs que précédemment.

TABLEAU VI

TERME SPECTRAL		$Q (10^{-24} \text{ cm}^2)$		
		GOLLNOW	STEUDEL	BELLEVEUE
Lu I	$5d6s^2 \quad {}^2D_{3/2}$	—	5,9	—
	$5d6s^2 \quad {}^2D_{5/2}$	5,98	5,0	—
	$6s^2 6p \quad {}^2P_{3/2}^0$	—	—	3,55
Lu II	$5d6s \quad {}^3D_1$	5,60	5,49	5,49
	$5d6s \quad {}^3D_2$	5,83	5,30	—
	$5d6s \quad {}^3D_3$	5,98	6,16	—
	$6s6p \quad {}^3P_0$	4,44	4,27	—
	$6s6p \quad {}^3P_2$	4,0	3,85	—
	$6s6p \quad {}^3P_1$	—	—	—

Gollnow et Steudel considèrent la configuration $6s6p$ comme perturbée et ils ont adopté comme valeur du moment quadrupolaire respectivement 5,9 et $(5,6 \pm 0,6) \cdot 10^{-24} \text{ cm}^2$. Le fait que de $6s^2 6p \quad {}^2P_{3/2}^0$ nous déduisons une valeur de Q encore inférieure à celles calculées par ces auteurs à partir des termes $6s6p \quad {}^3P_{1,2}^0$, nous conduit à penser que dans les trois cas on se trouve en présence d'un effet de « shielding » de Sternheimer [15] dû à l'électron $6p$. Que les termes des configurations $5d6s^2$ et $5d6s$ donnent systématiquement des valeurs plus élevées prouve simplement qu'on a un effet « antishielding » dû à l'électron $5d$, car la dispersion des valeurs n'est pas moins grande et rien ne permet de les préférer au premier groupe.

Le spectre d'arc étant un spectre à un électron, on peut, en supposant connu le moment magnétique, déduire le moment quadrupolaire du rapport

des facteurs d'intervalle B/A des termes au moyen de la formule suivante [16] :

$$Q = \frac{B}{A} \cdot \frac{\mu_B^2}{e^2} \cdot \frac{4l(l+1)}{j(2j-1)} \cdot \frac{\mu}{I} \cdot \frac{m}{m_P} \cdot \frac{F_r}{R_r}.$$

Si l'on admet que $\mu = 2,0 \mu_N$, on obtient les résultats indiqués dans le tableau VII, où les facteurs d'intervalle des termes 2D sont empruntés à Steudel.

TABLEAU VII

TERME SPECTRAL	$5d6s^2$		$6s^2 6p \quad {}^2P_{3/2}^0$
	${}^3D_{3/2}$	${}^2D_{5/2}$	
$\frac{B}{A}$	7,80	9,64	9,47
$\frac{Q}{\mu} \cdot 10^{24}$	3,185	1,300	1,355
$Q (10^{-24} \text{ cm}^2)$	6,4	2,6	2,7

Ce procédé de calcul du moment quadrupolaire qui est généralement considéré comme le plus correct puisqu'il permet d'éliminer l'incertitude provenant de l'évaluation de $1/r^3$, nous conduit à des résultats inconciliables avec les valeurs trouvées précédemment et l'accord entre les valeurs déduites des termes ${}^2D_{5/2}$ et ${}^2P_{3/2}^0$ doit être considéré comme fortuit.

Dans l'état actuel de nos connaissances sur l'effet Sternheimer, il est impossible de préciser davantage la valeur du moment quadrupolaire et nous adopterons provisoirement les valeurs suivantes :

$$Q^{175} = (4,0 \pm 0,5) \frac{1}{1-R} \cdot 10^{-24} \\ = (5,6 \pm 0,6) \frac{1}{1-R'} \cdot 10^{-24} \text{ cm}^2$$

où R et R' sont respectivement les corrections de shielding des électrons $6p$ et $5d$.

VI. Comparaison avec les prévisions théoriques.

— Le modèle de Mottelson et Nilsson [17] permet de prédire les spins et les moments des deux isotopes du lutécium.

Pour ${}^{175}_{71}\text{Lu}$, l'orbite $[404 \ 7/2]$ fournit l'état fondamental $\Omega = 7/2$ + pour le 71^e proton, et, par suite, le spin $7/2$. En supposant que l'excentricité du noyau $\delta = 0,28$, Nilsson prévoit un moment magnétique de $+ 1,4 \mu_N$, soit 30 % trop faible.

Si Q_0 est le moment quadrupolaire intrinsèque du noyau, on a :

$$Q_0 = \frac{4}{5} \delta Z F_0^2 \left(1 + \frac{1}{2} \delta + \dots \right)$$

où le rayon du noyau

$$R_0 = 1,2 \cdot 10^{-13} A^{1/3} \text{ cm.}$$

D'où :

$$Q_0^{175} = 8,04 \cdot 10^{-24} \text{ cm}^2.$$

Cette valeur est en excellent accord avec les valeurs 7,6 et $8,5 \cdot 10^{-24} \text{ cm}^2$ déduites de mesures d'excitation coulombienne par Heydenburg et Temmer [18] et avec le comportement systématique des moments quadrupolaires que Townes [19] a décrit en traçant la courbe Q_0/R_0^2 en fonction du nombre impair de nucléons : pour $Z = 71$, cette courbe permet de prévoir $Q_0/R_0^2 \sim 18$, alors qu'avec la valeur 0,28 admise pour δ ,

$$(Q_0^{175}/R_0^2 = 18,1.$$

Le moment quadrupolaire se déduit du moment intrinsèque par la relation :

$$Q = \frac{I(2I-1)}{(I+1)(2I+3)} Q_0.$$

D'où :

$$Q^{175} = \frac{7}{15} Q_0^{175} = 3,75 \cdot 10^{-24} \text{ cm}^2,$$

ce qui confirmerait l'effet d'antishielding de l'électron $5d$.

Pour ^{176}Lu , le modèle de Mottelson et Nillson

prévoit que le niveau du 105^e neutron est l'orbite $[514 \ 7/2]$, soit $\Omega = 7/2$. — Il résulte de la règle du couplage sphéroïdal de Gallagher et Moszkowski [20] que $I = \Omega_p + \Omega_n = 7$. Pour le moment magnétique, ces auteurs prévoient $+ 3,06 \mu_N$, tandis que Hooke [21] prédit $+ 2,93 \mu_N$ avec la théorie du couplage fort des noyaux impair-impair. L'accord de ces deux prédictions avec la valeur expérimentale $\mu^{176} = + 2,8 \pm 0,3 \mu_N$ est tout à fait satisfaisant. Il n'y a pas eu, à notre connaissance, de détermination directe du moment quadrupolaire intrinsèque Q_0^{176} . Comme

$$Q^{176} = \frac{91}{136} Q_0^{176} \quad \text{et} \quad Q^{175} = \frac{7}{15} Q_0^{175},$$

on a :

$$\frac{Q_0^{176}}{Q_0^{175}} = \frac{136}{195} \frac{Q_0^{175}}{Q_0^{176}}.$$

Avec la valeur mesurée $Q^{176}/Q^{175} = 1/0,71$, il vient : $Q_0^{176} = 0,98 Q_0^{175}$. Ce résultat permet de conclure que les deux noyaux ont pratiquement la même déformation.

Les auteurs sont heureux d'exprimer au Professeur Jacquinet leur gratitude pour avoir mis à leur disposition les ressources du Laboratoire Aimé-Cotton et leur reconnaissance pour l'intérêt qu'il a pris à ce travail.

Manuscrit reçu le 16 mars 1961.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] SCHULER (H.) et GOLLNOW (H.), *Z. Physik*, 1939, **113**, 1.
- [2] STEUDEL (A.), *Naturwiss.*, 1957, **44**, 371 ; *Z. Physik*, 1958, **152**, 599.
- [3] JACQUINOT (P.) et DUFOUR (Ch.), *J. Recherches C. N. R. S.*, 1948, **2**, 91.
- [4] KALITEVSKY (N. I.) et TCHAIKA (M. P.), *Doklady Akad. Nauk S. S. S. R.*, 1959, **126**, 57.
- [5] CHABBAL (R.), *J. Recherches C. N. R. S.*, 1953, **5**, 138.
- [6] CHABBAL (R.), *Revue d'Optique*, 1958, **37**, 49, 336 et 501.
- [7] KOPFERMANN (H.), *Kernmomente*, 2^e édition, Akademische Verlagsgesellschaft, Francfort-sur-le-Main, 1956.
- [8] GERSTENKORN (S.), *Rapport C. E. A.*, D. M. C. A. n° 748, 1956.
- [9] SPECK (D. R.) et JENKINS (F. A.), *Phys. Rev.*, 1956, **101**, 1831.
- [10] SCHULER (H.) et SCHMIDT (Th.), *Z. Physik*, 1935, **95**, 265.
- [11] CASIMIR (H. B. G.), *Thèse*, Teyler's Tweede Genootschap, Haarlem, 1936.
- [12] GOLLNOW (H.), *Z. Physik*, 1936, **103**, 443.
- [13] BREIT (G.) et WILLS (L. A.), *Phys. Rev.*, 1933, **44**, 470.
- [14] BOVEY (L. F. H.) et PEARSE (R. W. B.), *A. E. R. E. C/R* 1976, 1956.
- [15] STERNHEIMER (R. M.), *Phys. Rev.*, 1954, **95**, 736.
- [16] DAVIS (L.), FELD (B.), ZABEL (W.) et ZACHARIAS (J.), *Phys. Rev.*, 1949, **76**, 1076.
- [17] MOTTELSON (B. R.) et NILLSON (S. G.), *Mat. Fys. Skr. Dan. Vid. Selsk.*, 1959, **1**, n° 8.
- [18] HEYDENBURG (N. P.) et TEMMER (G. M.), *Phys. Rev.*, 1956, **104**, 981.
- [19] TOWNES (C. H.), *Determination of Nuclear Quadrupole Moments. Handbuch der Physik*, vol. XXXVIII/1, p. 450, Springer-Verlag, 1958.
- [20] GALLAGHER (C. J., Jr.) et MOSZKOWSKI (S. A.), *Phys. Rev.*, 1958, **111**, 1282.
- [21] HOOKE (W. M.), *Phys. Rev.*, 1959, **115**, 453.

SUR LES SPECTRES D'ÉMISSION DES SULFURES MIXTES DE ZINC ET DE CADMIUM ACTIVÉS À L'ARGENT : EXISTENCE DE DEUX BANDES D'ÉMISSION

Par M. HUGUES PAYEN DE LA GARANDERIE,

Laboratoire de Luminescence, Faculté des Sciences de Paris.

Résumé. — Les ZnS et CdS activés au cuivre et à l'or présentent deux bandes principales d'émission. Il en est de même des CdS activés à l'argent. Seuls les ZnS(Ag) paraissaient faire exception. Le présent travail confirme des indications antérieures d'Henderson et collaborateurs sur l'existence des deux bandes également dans les ZnS(Ag). Ces bandes ont été suivies dans les sulfures mixtes ZnCdS(Ag), ce qui en a permis l'identification précise ⁽¹⁾.

Abstract. — Two main emission bands are observed in the spectra of the Cu- and Au- activated zinc and cadmium sulphides. The same is true for CdS(Ag). But ZnS(Ag) appears as an exception. The present work gives evidence for the occurrence of both bands in ZnS(Ag) also, supporting previous indications by Henderson and co-workers. The displacement of these bands has been studied in the mixed crystals ZnCdS(Ag), leading to their accurate identification.

I. Introduction. — La plupart des sulfures luminescents photoconducteurs présentent deux bandes principales d'émission. C'est le cas du sulfure de zinc activé au cuivre ZnS(Cu). Généralement la plus intense de ces bandes à son maximum dans le vert, à une longueur d'onde voisine de 0,530 μ . Mais à basse température on peut en observer une deuxième dans le bleu, dont le maximum est à 0,450 μ environ ; cette bande est souvent éteinte dès la température ordinaire et en tous cas disparaît 100 ou 150° plus bas que la bande verte.

BANDES D'ÉMISSION DE ZnS(Cu). TEMPÉRATURE ORDINAIRE

	BANDE VERTE	BANDE BLEUE
ZnS wurtzite (" gap " = 3,70 eV)	5 230 Å	4 450 Å
ZnS blende (" gap " = 3,64 eV)	5 350 Å	4 600 Å

Dans certains produits (haute concentration en activateur et absence d'oxygène dans l'atmosphère de calcination) on peut rendre la bande bleue prédominante [1].

Il y a quelques années encore, certains auteurs se demandaient si la bande bleue des ZnS(Cu) était réellement due à l'activateur cuivre et s'il ne s'agissait pas de la bande bleue des ZnS « self-activés », attribuée à des lacunes [Zn]. Les longueurs d'onde de ces deux bandes à température ordinaire sont en effet voisines ; mais lorsqu'on

abaisse la température elles se déplacent en sens inverses [2], [3].

	TEMPÉRATURE ORDINAIRE	AIR LIQUIDE
Bande bleue du ZnS(Cu) Lacunes [Zn]	4 450 Å 4 520 Å	4 380 Å 4 560 Å

Deux bandes ont été aussi observées pour le sulfure de cadmium activé au cuivre CdS(Cu) et pour le sulfure de zinc activé à l'or ZnS(Au). E. Grillot en 1950 a montré l'existence d'une deuxième bande pour le sulfure de cadmium activé à l'argent CdS(Ag) [4].

Rien d'analogue n'avait pu être obtenu pour le sulfure de zinc activé à l'argent ZnS(Ag), dont le spectre d'émission montre un seul maximum dans le bleu. Toutefois Henderson, Ranby et Halstead [5] ont obtenu une indication en faveur de l'existence d'une deuxième bande de plus grande longueur d'onde. Admettant que s'il y avait un seul type de centres luminogènes introduits par l'argent dans le réseau cristallin on aurait une répartition gaussienne de l'intensité lumineuse $I(\nu)$ en fonction de la fréquence ν , ils trouvent que l'expression

$$I(\nu) = I_0 e^{-\alpha(\nu-\nu_0)^2}$$

ne représente pas bien le spectre observé. Ils y parviennent par contre avec une formule du type :

$$I(\nu) = K_1 e^{-\alpha_1(\nu-\nu_1)^2} + I_2 e^{-\alpha_2(\nu-\nu_2)^2}.$$

Le premier terme représente la bande principale avec un maximum à la longueur d'onde λ_1 , le deu-

⁽¹⁾ Certains des résultats contenus dans ce travail ont été déjà présentés au Colloque sur les centres colorés et la luminescence cristalline, organisé à Turin par le Pr G. Bonfiglioli (5-7 septembre 1960).

xième une bande moins intense avec un maximum pour la longueur d'onde λ_2 .

BANDES D'ÉMISSION DE ZnS(Ag) D'APRÈS HENDERSON [5]. TEMPÉRATURE ORDINAIRE		
BANDE PRINCIPALE		BANDE SECONDAIRE
ZnS wurtzite	4 370 Å	4 760 Å
ZnS blende	4 520 Å	5 000 Å

Contrairement à ce qui se passe pour les ZnS(Cu), la bande bleu-violet des ZnS(Ag) wurtzite se distingue aisément de la bande bleu clair des lacunes [Zn] ; d'ailleurs elle se déplace vers les courtes longueurs d'onde par refroidissement, contrairement à celle des lacunes [Zn] [3].

Même en modifiant la température de calcination ainsi que les concentrations en activateur, ou en fondant (présent ou absent selon les essais), nous ne sommes pas parvenus à modifier appréciablement l'amplitude de la bande secondaire : dans les ZnS(Ag), celle-ci semble n'apparaître que comme un faible élargissement de la bande principale du côté des grandes longueurs d'onde.

Toutefois, nous pouvons, semble-t-il, confirmer l'existence de cette deuxième bande :

1° Nous avons fait une étude expérimentale des spectres d'émission des sulfures mixtes ZnCdS(Ag), avec des proportions variables de ZnS et de CdS. Nous avons ainsi pu suivre de proche en proche les deux bandes λ_1 et λ_2 depuis ZnS(Ag) exempt de CdS jusqu'à CdS(Ag) exempt de ZnS, où nous retrouvons les résultats de E. Grillot [4]. Or pour CdS(Ag) l'existence de deux centres Ag distincts ne saurait faire de doute : l'émission de grande longueur d'onde λ_2 est prépondérante dans les sulfures calcinés à haute température 900 ou 1 000 °C, l'émission de plus courte longueur d'onde λ_1 est prépondérante dans les sulfures calcinés à basse température 600 ou 700 °C [4].

2° Chacun des sulfures mixtes ZnCdS(Ag) a été étudié à température ordinaire 20 °C et à plus haute température, généralement 105 °C. Dans ce dernier cas la bande λ_2 est relativement moins éteinte que la bande λ_1 de même que dans les ZnS(Cu) la bande verte s'éteint moins rapidement que la bleue. Nous avons effectivement constaté que les spectres se déforment très peu du côté des courtes longueurs d'onde quand la température s'élève, et beaucoup du côté des grandes longueurs d'onde.

II. Spectres dus aux niveaux localisés de l'activateur dans la bande interdite du réseau cristallin. — Un sulfure luminescent photoconducteur présente deux bandes d'énergie permise, la bande de valence et la bande de conductibilité, séparés par une bande interdite (fig. 1).

L'activateur introduit des niveaux localisés dans la bande interdite. Par analogie avec ce qui se passe dans les ZnS(Cu), nous admettrons que le niveau fondamental du centre Ag est situé à environ 1 eV au-dessus de la bande de valence, tandis

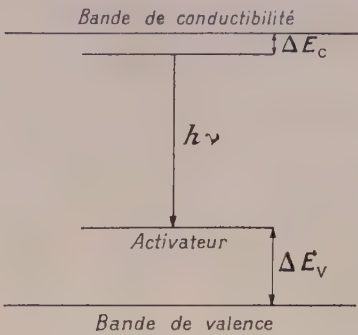


FIG. 1. — Schéma d'un centre luminogène.

que le niveau excité est extrêmement proche du bas de la bande de conductibilité. D'autres centres d'un modèle différent peuvent exister également (modèle de Lambe et Klick [6]) ; nous y reviendrons.

Sous l'action de la lumière ultra-violette, le centre Ag passe dans l'état excité, ce qui se traduit en définitive par son ionisation. L'émission lumineuse a lieu lorsqu'un électron de la bande de conductibilité se trouve trappé par le niveau excité, puis retombe sur le niveau fondamental. La chute directe de l'électron dans le niveau fondamental à partir de la bande de conductibilité est vraisemblablement un événement rare : sinon les spectres d'émission dépendraient beaucoup du mode d'excitation employé, ce qui n'est pas le cas.

ÉQUATION DU SPECTRE D'ÉMISSION. — D'après ce qui précède, nous pouvons accepter pour décrire les spectres d'émission dans un sulfure photoconducteur la même formulation que celle utilisée pour les KCl(Tl). L'interaction entre le centre et le réseau est à l'origine de l'élargissement du spectre en une bande d'émission.

Soit $|\mu|^2$ le carré de l'élément de matrice du moment dipolaire et $I(\nu)$ l'intensité lumineuse pour la fréquence ν . On a :

$$I(\nu) = \frac{64\pi^4 \nu^4}{3hc^3} \sum |\mu|^2$$

la sommation étant à effectuer sur tous les états excités vibrationnels du centre luminogène à partir desquels l'émission d'un photon $h\nu$ est possible. Ces états sont décrits par des fonctions d'onde d'oscillateur harmonique $\psi^e(r - r_0)$ et $\psi^f(r)$:

$$\mu = \text{Const.} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^e(r - r_0) \psi^f(r) dr$$

r décrit la configuration des ions en vibration et r

le décalage de la position d'équilibre des ions entre l'état fondamental et l'état excité du centre. Dans les ZnS, il s'agit vraisemblablement, en première approximation, de la distance au centre des ions soufre ou du coactivateur voisins du centre lumino-gène.

Un calcul classique (voir par exemple [7]) montre que la sommation

$$G(\nu) = \sum |\mu|^2$$

conduit à un facteur sensiblement Gaussien :

$$G(\nu) = \exp \left[-\frac{1}{2} \frac{k_e \hbar^2 (\nu - \nu_0)^2}{k_f^2 r_0^2} \cdot \frac{2}{\hbar \nu_e} \tanh \frac{\hbar \nu_e}{2kT} \right].$$

Dans cette formule, ν_e représente la fréquence de vibration du centre dans l'état excité et k_e est relié à ν_e par

$$2\pi\nu_e = \sqrt{k_e/M}$$

M masse des ions en vibration. De même ν_f est la fréquence de vibration du centre dans l'état fondamental et l'on a

$$2\pi\nu_f = \sqrt{k_f/M}.$$

Enfin T est la température absolue et k la constante de Boltzmann.

Nous poserons pour simplifier :

$$G(\nu) = e^{-\alpha(\nu-\nu_0)^2}$$

et

$$I(\nu) = \frac{64\pi^4 \nu^4}{3hc^3} G(\nu).$$

Bien que le facteur ν^4 varie de 1 à 16 d'une extrémité à l'autre du spectre visible, souvent les spectres expérimentaux se laissent bien représenter par une formule du type :

$$I(\nu) = I_0 e^{-\alpha(\nu-\nu_0)^2}$$

à condition qu'ils ne comprennent qu'une seule bande.

Si le spectre comprend deux bandes d'émission, on doit avoir pour $I(\nu)$ l'expression :

$$I(\nu) = A_1 \nu^4 e^{-\alpha_1(\nu-\nu_1)^2} + A_2 \nu^4 e^{-\alpha_2(\nu-\nu_2)^2}$$

ou la relation approchée :

$$I(\nu) = I_1 e^{-\alpha_1(\nu-\nu_1)^2} + I_2 e^{-\alpha_2(\nu-\nu_2)^2}.$$

L'approximation gaussienne pour $G(\nu)$ peut n'être pas valable ; c'est le cas quand l'état excité du centre et l'état fondamental correspondent à des configurations des ions extrêmement voisines (r_0 petit). Dans ces conditions, à un centre donné correspond une bande unique dissymétrique et la résolution de cette bande en composantes gaussiennes n'est pas permise. Un exemple bien connu est celui de la willémitte $\text{Zn}_2\text{SiO}_4(\text{Mn})$, étudié par Klick et Schulman [8]. Mais le cas de l'activateur

manganèse (retournement du spin d'un électron) est très particulier et il ne semble pas qu'il y ait lieu de mettre en doute la validité de l'approximation gaussienne dans les sulfures phosphorescents du type $\text{ZnS}(\text{Cu})$ ou $\text{ZnS}(\text{Ag})$ [9].

PARAMÈTRES DES SPECTRES D'ÉMISSION. — Les spectres d'émission construits expérimentalement donnent l'intensité lumineuse $I(\lambda)$ en fonction de la longueur d'onde λ . On a évidemment :

$$I(\lambda) d\lambda = I(\nu) d\nu$$

d'où

$$I(\lambda) = I(\nu) c/\lambda^2.$$

Par suite, pour une bande d'émission unique, nous utiliserons l'expression :

$$I(\lambda) = A(1/\lambda^6) e^{-\alpha\left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda_0}\right)^2}.$$

La longueur d'onde λ_m du maximum du spectre

$$dI(\lambda_m)/d\lambda = 0$$

est plus courte que λ_0 :

$$\lambda_0 - \lambda_m = 3\lambda_m^3(\alpha - 3\lambda_m^2).$$

Mais en fait l'écart est faible et varie suivant λ_m de 5 m μ à 15 m μ .

III. Spectres expérimentaux des sulfures mixtes ZnCdS (Ag). — Nous avons réalisé une gamme de sulfures du type

$$x \text{ CdS}, (1-x) \text{ ZnS (Ag)}$$

x proportion (en poids) de CdS variant de 0 à 100 %. Nous donnons ci-dessous les spectres obtenus pour quelques-uns d'entre eux.

Tous sont activés par $2 \cdot 10^{-4}$ Ag et calcinés à 650 °C pendant une demi-heure, en courant d'azote. Cette basse température de calcination favorise d'après E. Grillot [4] l'apparition de la bande de courte longueur d'onde, s'étendant jusqu'au visible, des CdS(Ag) à luminescence normalement infrarouge.

Le ZnS était donc sous forme blende, tandis que les ZnCdS sont sous la forme wurtzite : on sait en effet depuis les premiers travaux de A. Guntz [10] que dans les sulfures mixtes le CdS impose la cristallisation dans le système hexagonal. Aucune discontinuité ne s'observe d'ailleurs entre la blende et la wurtzite, aussi bien dans le déplacement des pics des bandes d'émission que dans la variation de la largeur de la bande interdite (Kröger [11]).

L'introduction du fondant (3 % NaCl) ne modifiait pas les positions des bandes d'émission, mais par contre faisait varier en général l'intensité de la luminescence émise. Pour ZnS, surtout lorsqu'il est calciné à une température aussi basse que 650 °C, le fondant joue un rôle favorable. Pour CdS par contre, nous trouvons comme l'avait déjà indiqué Grillot que son introduction est plutôt néfaste.

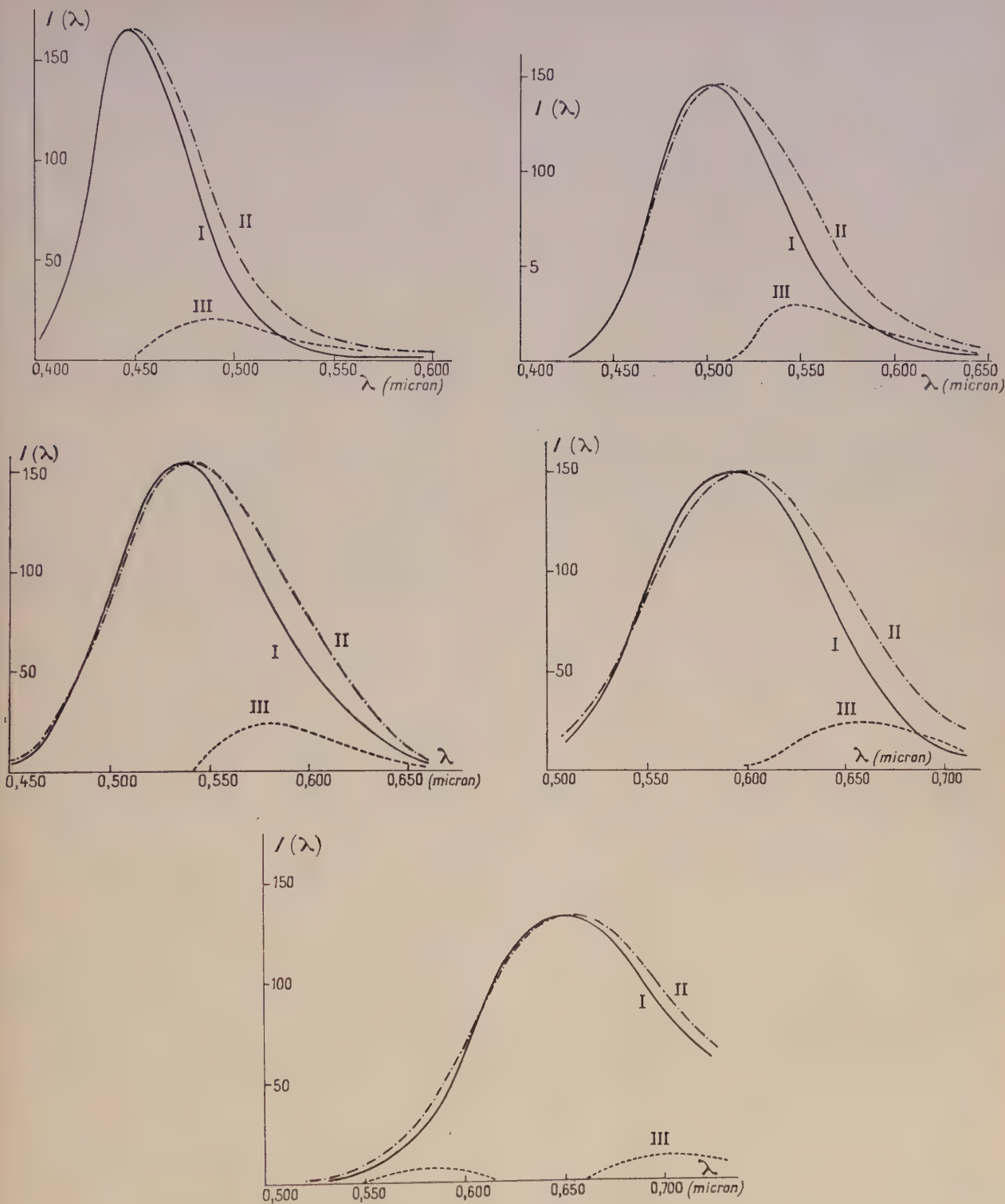


FIG. 2. — Spectres d'émission de ZnS(Ag) et des sulfures mixtes ZnCdS(Ag) renfermant respectivement 0,20, 40, 60 et 80 % de CdS.

Courbe I : Spectre à 20 °C.

Courbe II : Spectre à 105 °C, amené à la même ordonnée maximum.

Courbe III : Courbe II — courbe I, indiquant le profil approximatif de la bande secondaire.

Concentration en activateur 2.10^{-4} g Ag/g sulfure. Calcination à 650 °C.

La figure 3 indique le déplacement de la longueur d'onde du maximum des deux bandes λ_{m1} et λ_{m2} lorsque x varie.

Pour la bande principale vers le bleu, l'on retrouve en gros les résultats déjà connus. Plus précisément, nos résultats sont très voisins de ceux de Rothschild [12] tant que la proportion de CdS ne dépasse pas 60 à 70 % ; au delà, les auteurs qui n'indiquent qu'un seul pic donnent évidemment à celui-ci une position intermédiaire entre λ_{m1} et λ_{m2} .

Pour obtenir simplement la position du maximum de la bande secondaire de grande longueur d'onde, nous avons tracé les spectres $I(\lambda)$ à différentes températures, par exemple à la température ordinaire 20 °C et à la température 105 °C où l'extinction thermique est déjà importante, surtout pour la bande principale. Les deux spectres ont été alors ramenés à la même hauteur maximum, comme sur les figures 2, et nous avons admis que la différence des ordonnées des deux courbes donnait le profil de la bande secondaire. Cette façon de faire néglige les variations de position et de largeur de la bande principale lorsque la température s'élève ; mais elle paraît approximativement justifiée si l'on remarque la coïncidence des deux spectres du côté des courtes longueurs d'onde.

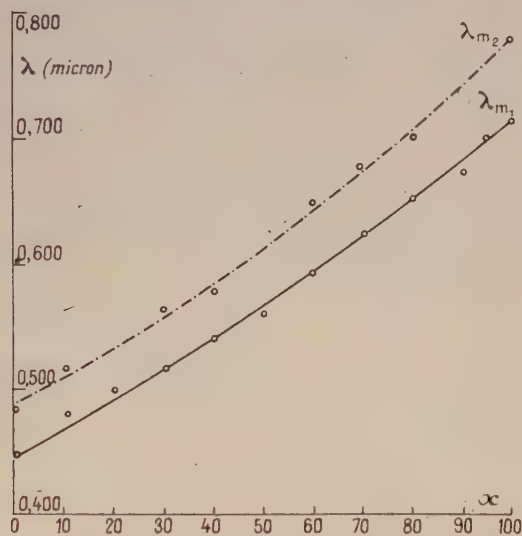


FIG. 3. — Déplacement des maxima des bandes d'émission pour une gamme de ZnCdS(Ag).

x pourcentage en poids de CdS.

Concentration en activateur 2.10^{-4} g Ag/g sulfure. Calcination à 650 °C. λ_{m1} bande principale ; λ_{m2} bande secondaire.

Une analyse plus fine des spectres nécessite une précision que ne permettent guère la plupart de nos mesures : dès que la proportion de CdS dans le sulfure devient notable, une grande partie du spectre est émise dans le rouge, où la dispersion du spectrographe utilisé devient faible. Toutefois nous avons effectué cette étude sur le ZnS(Ag) à 20 °C.

D'après ce qu'on a vu précédemment, nous avons cherché à représenter la répartition de l'intensité lumineuse émise par une expression de la forme :

$$I(\lambda) = A_1(1/\lambda^6) e^{-\alpha_1(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda_1})^2} + A_2(1/\lambda^6) e^{-\alpha_2(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda_2})^2}.$$

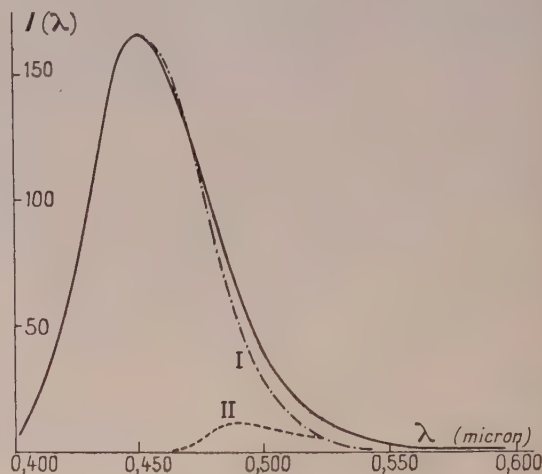


FIG. 4. — Spectre de ZnS(Ag).

En trait plein : spectre expérimental.

En pointillé : analyse du spectre en deux bandes, d'équations respectives :

$$I_1(\lambda) = (A_1/\lambda^6) e^{-35,7(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{0,458})^2}$$

(courbe I, bande principale) et :

$$I_2(\lambda) = (A_2/\lambda^6) e^{-64,5(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{0,500})^2}$$

(courbe II, bande secondaire).

Concentration en activateur 2.10^{-4} g Ag/g ZnS. Température de calcination 650 °C.

Nous y sommes parvenus avec les valeurs suivantes des paramètres :

$$\lambda_1 = 0,458 \mu \quad \alpha_1 = 35,7 \mu^2$$

$$\lambda_2 = 0,500 \mu \quad \alpha_2 = 64,5 \mu^2$$

$$A_2/A_1 = 0,145.$$

Ces valeurs de λ_1 et λ_2 correspondent aux maxima λ_0 des éléments de matrice $G(\nu)$. Les positions des pics λ_m des bandes d'émission, que l'on en déduit au moyen de la formule

$$\lambda_0 - \lambda_m = 3\lambda_m^3/(\alpha - 3\lambda_m^2)$$

sont respectivement

$$\lambda_{m1} = 0,450 \mu \quad \lambda_{m2} = 0,495 \mu.$$

On comparera aux valeurs obtenues par la méthode simple précédente et figurant sur le graphique de la figure 3 :

$$\lambda_{m1} = 0,450 \mu \quad \lambda_{m2} = 0,485 \mu.$$

Pour la bande secondaire la précision est faible 10 m μ , mais néanmoins suffisante pour affirmer qu'il ne s'agit pas d'un effet de contamination par

le cuivre (position de la bande verte du cuivre dans ZnS blende : 5 350 Å). A 105 °C l'émission étant fortement réduite du fait de l'extinction thermique il est difficile de trouver les paramètres relatifs à la deuxième bande. Pour la bande principale nous donnerons :

$$\lambda_1 = 0,465 \mu \quad \alpha_1 = 31,2 \mu^2.$$

On observe donc un élargissement de la bande, α diminuant avec la température, ce qui est conforme à la théorie. Cet effet est accompagné d'un léger décalage vers le rouge. Ces deux phénomènes s'ajoutent pour déformer la partie du spectre située vers les grandes longueurs d'onde, tandis qu'ils se compensent du côté du violet. C'est pourquoi la méthode simple utilisée ci-dessus (fig. 3) ne donne que des résultats approchés. Toutefois l'amplitude de ces phénomènes reste très faible.

DISPOSITIF EXPÉRIMENTAL UTILISÉ. — Les spectres ont été obtenus à l'aide d'un monochromateur Desvignes fonctionnant dans le visible, et d'un photomultiplicateur d'électrons A. Lallemant à vingt étages, débitant dans un galvanomètre Zernicke. L'étalonnage a été fait en utilisant une lampe Philips à filament de tungstène dont la température de couleur a été préalablement mesurée.

IV. Résultats et discussion. — Nos résultats sont en accord avec l'existence des deux bandes λ_1 et λ_2 données par Henderson, Ranby et Halstead [5] et les positions de ces bandes dans les sulfures mixtes x CdS (1 — x) ZnS(Ag) se raccordent progressivement aux bandes dans l'infrarouge proche décrites par E. Grillot [4]. Nous donnerons pour position de ces bandes :

	λ_{m1}	λ_{m2}
ZnS(Ag) blende	4 500 Å	4 950 Å
CdS(Ag) wurtzite	7 160 Å	7 800 Å

Les différences avec les valeurs données par les précédents auteurs peuvent être imputées aux erreurs d'expérience.

En accord avec E. Grillot [13], nous considérerons ces bandes comme les homologues des bandes bleue et verte des ZnS(Cu), pour lesquelles un modèle a été récemment proposé [14]. Ce modèle, en accord avec le schéma de niveaux de la figure 1, considère le niveau fondamental des centres comme située à une hauteur ΔE_v de l'ordre d'un électron-volt au-dessus de la bande de valence. Le niveau excité du centre est situé à une distance ΔE_c au-dessous de la bande de conductibilité ; ΔE_c est faible, surtout pour le centre bleu. Pour le centre vert, ce niveau est légèrement plus profond et on peut le considérer comme un niveau donneur associé au niveau accepteur fondamental [15]. Il faut admettre que le cuivre et l'or s'associent facilement

à un tel donneur, l'argent plus difficilement, du moins dans ZnS et dans les sulfures mixtes contenant une forte proportion de ZnS. Dans CdS(Ag) par contre, les bandes λ_1 et λ_2 retrouvent des intensités comparables, comme dans ZnS(Cu).

Dans ZnS(Cu), la bande bleue est favorisée par les concentrations élevées en activateur, la bande verte par l'incorporation de donneurs (oxygène ou halogène) en concentration égale à celle de l'activateur. De la même façon, dans CdS(Ag), l'émission visible (queue de la bande λ_1) est défavorisée par l'incorporation du fondant NaCl ; van Gool [16] a montré que les phosphores avec des concentrations égales d'activateur et de coactivateur ne présentent que l'émission infra-rouge ; il ne distingue pas deux pics dans cette émission car il a calciné ses sulfures à température élevée 850 ou 950 °C : ses résultats s'appliquent donc en réalité à la bande λ_2 .

Enfin, du point de vue de la persistance de la phosphorescence, la bande bleue du cuivre est peu persistante, tandis que les centres verts sont liés aux pièges profonds. Les ZnS(Ag) qui présentent la bande bleue très prépondérante sont peu persistants. De ce point de vue aussi, il paraît donc normal d'assimiler la bande fondamentale des ZnS(Ag) à la bande bleue des ZnS(Cu).

POSITIONS ET ÉNERGIES
DES DIFFÉRENTES BANDES D'ÉMISSION
DUES AUX ACTIVATEURS Cu, Ag ET Au DANS ZnS ET CdS

	λ	$h\nu$	$E_{gap} - h\nu = \Delta E_v + \Delta E_c$
ZnS(Cu) wurtzite	4 450 Å	2,79 eV	0,91 eV
	5 230 Å	2,37 eV	1,33 eV
ZnS(Cu) blende	4 600 Å	2,70 eV	0,94 eV
	5 350 Å	2,32 eV	1,32 eV
ZnS(Ag) wurtzite	4 370 Å	2,84 eV	0,86 eV
	4 760 Å	2,61 eV	1,09 eV
ZnS(Ag) blende	4 500 Å	2,76 eV	0,88 eV
	4 950 Å	2,51 eV	1,13 eV
ZnS(Au) wurtzite	4 700 Å	2,64 eV	1,06 eV
	5 300 Å	2,34 eV	1,36 eV
ZnS(Au) blende	4 800 Å	2,59 eV	1,05 eV
	5 500 Å	2,26 eV	1,38 eV
CdS(Cu) wurtzite	8 200 Å	1,51 eV	0,92 eV
	10 200 Å	1,22 eV	1,21 eV
CdS(Ag) wurtzite	7 160 Å	1,73 eV	0,70 eV
	7 800 Å	1,59 eV	0,84 eV
CdS(Au) wurtzite [20]	8 000 Å	1,55 eV	0,88 eV
	11 500 Å	1,08 eV	1,35 eV

BANDES A COURTE LONGUEUR D'ONDE :

ZnS	3 900 Å	3,18 eV	0,52 eV
CdS	6 200 Å	2,00 eV	0,43 eV

BANDE A COURTE LONGUEUR D'ONDE DANS ZnS ET CdS. — Fonda et Klick ont montré, indépendamment, que les CdS(Ag) à forte concentration en argent possèdent une émission rouge, avec pic vers

6 200 Å [17], [18]. Cette bande n'apparaît qu'à basse température ; elle est souvent étudiée à l'air liquide, alors qu'elle est éteinte à température ordinaire.

Généralement cette émission est attribuée, soit à des ions Ag interstitiels, soit aux lacunes S. Melamed [19] a donné des arguments en faveur de la seconde interprétation. Van Gool a suggéré [16] de la décrire par des centres du modèle de Lambe et Klick.

La bande homologue dans les ZnS est située vers 3 900 Å.

Le tableau ci-dessous montre que l'énergie du photon lumineux émis est beaucoup plus voisine de la largeur de la bande interdite que pour les autres bandes d'émission dues aux activateurs Cu, Ag ou Au. En accord avec les auteurs cités ci-dessus, nous pensons donc qu'il ne faut pas considérer cette bande comme homologue des précédentes.

Manuscrit reçu le 4 mars 1961.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] GRILLOT (E.), *J. Physique Rad.*, 1956, **17**, 624.
- [2] SHRADER (R. S.) et LARACH (S.), *Phys. Rev.*, 1956, **103**, 1899.
- [3] VAN GOOL (W.), *Thesis*, Amsterdam, 1961, p. 28.
- [4] GRILLOT (E.), *C. R. Acad. Sc.*, 1950, **230**, 1159.
GRILLOT (M.) et GRILLOT (E.), *J. Chimie-Physique*, 1956, **53**, 521.
- [5] HENDERSON (S. T.), RANBY (P. W.) et HALSTEAD (M. B.), *J. Electrochem. Soc.*, 1959, **106**, 27.
- [6] LAMBE (J.) et KLICK (C. C.), *Phys. Rev.*, 1955, **100**, 1586 ; *J. Physique Rad.*, 1956, **17**, 663.
- [7] CURIE (D.), *Luminescence cristalline*, Monographies Dunod, Paris, 1960, p. 52.
- [8] KLICK (C. C.) et SCHULMAN (J. H.), *J. Opt. Soc. Amer.*, 1952, **42**, 910.
- [9] PAYEN DE LA GARANDERIE (H.) et CURIE (D.), *C. R. Acad. Sc.*, 1959, **248**, 3151.
- [10] GUNTZ (A.), *Thèse*, Paris, 1925, p. 39.
- [11] KRÖGER (F. A.), *Z. Krystall.*, 1939, A **100**, 435, 543 ; *Thèse*, Amsterdam, 1940, p. 70.
- [12] ROTHSCHILD (S.), *Z. Physik*, 1937, **108**, 24 ; *Trans. Faraday Soc.*, 1945, **42**, 635.
- [13] GRILLOT (E.), *J. Physique Rad.*, 1956, **17**, 624.
- [14] CURIE (G.) et CURIE (D.), *J. Physique Rad.*, 1960, **21**, 127.
- [15] WILLIAMS (F. E.) et PRENER (J. S.), *Phys. Rev.*, 1956, **101**, 1427 ; *J. Electrochem. Soc.*, 1956, **103**, 342 ; *J. Physique Rad.*, 1956, **17**, 667.
- [16] VAN GOOL (W.), *Philips Res. Rep.*, 1958, **13**, 157.
- [17] KLICK (C. C.), *J. Opt. Soc. Amer.*, 1951, **41**, 816.
- [18] FEHR (E. B.), FRIEDMAN (A. I.), STUDER (F. J.) et FONDA (G. R.), *J. Opt. Soc. Amer.*, 1952, **42**, 917.
- [19] MELAMED (N. T.), *Phys. Rev.*, 1957, **107**, 1727.
- [20] AVINOR (M.), *J. Electrochem. Soc.*, 1960, **107**, 608.

MOUVEMENTS INTERNES D'UNE PARTICULE RELATIVISTE

Par M. KLEMAN,

Théories Physiques, Institut Henri-Poincaré.

Résumé. — Une particule relativiste sans champ extérieur, obéissant aux lois de conservation de l'impulsion et du moment cinétique, est d'ordinaire décrite par un tenseur antisymétrique $\mathcal{M}_{\mu\nu}$ et sa dérivée covariante $\dot{\mathcal{M}}_{\mu\nu}$ ainsi que par une impulsion constante p_μ . Pour concrétiser le fait physique de la rotation interne, on introduit dans la théorie une deuxième particule ponctuelle, déduite de la première sans hypothèses supplémentaires : tout mouvement de point matériel peut être décrit comme un mouvement relatif de deux particules, lequel est analysé par un tenseur antisymétrique $\omega_{\alpha\beta}$, analogue au pseudo-vecteur rotation du corps solide de la mécanique classique. On trouve ainsi une formule qui lie les vitesses unitaires des deux points, mais où $\omega_{\alpha\beta}$ dépend de 6 paramètres arbitraires. Des considérations physiques simples de réciprocité entre ces deux points (réciprocité des impulsions et des vitesses) permettent de fixer ces degrés de liberté, et d'obtenir, dans le cas le plus général, une expression simple de la rotation. On passe ensuite à l'étude d'une classe particulière de mouvement de la particule relativiste, où la notion de réciprocité est étendue aux points eux-mêmes, la donnée de l'un permettant de passer à l'autre, et réciproquement. On élargit ainsi le mouvement de Weyssenhoff, où les deux points réciproques sont confondus.

Abstract. — A relativistic particle without external field, obeying to the laws of conservation of linear momentum and angular momentum, is usually described by a skew tensor $\mathcal{M}_{\mu\nu}$, its covariant derivative $\dot{\mathcal{M}}_{\mu\nu}$ and a constant linear momentum p_μ . In order to materialize the physical fact of internal rotation, we introduce in the theory a second point particle without supplementary assumptions : the motion of a material point-particle can be described as the relative motion of two particles, relative motion which is summarized by a skew tensor $\omega_{\alpha\beta}$, of the same nature as the rotation pseudovector of a rigid body in classical mechanics. So one finds a formula relating the unitary velocities of the two point-particles, but $\omega_{\alpha\beta}$ depends still on 6 arbitrary parameters. By obvious physical considerations of reciprocity between these two point-particles (reciprocity of momenta and velocities), we can make these degrees of freedom disappear and the rotation reduce to a simple expression. We then restrict ourselves to the study of a particular class of motion for a relativistic particle, the idea of reciprocity being extended to point-particles themselves. If one point-particle is given, the second is consequently found, and reciprocally. So one generalizes the so-called Weyssenhoff's motion, in which the two reciprocal points have the same space-time coordinates.

Nous nous proposons de définir dans cet article des quantités physiques capables de décrire une rotation interne d'une particule relativiste infiniment petite ; puis nous tenterons d'élargir ces définitions à une particule ayant une extension finie, à un fluide relativiste. On sait que ce dernier problème est difficile : la particule relativiste n'est pas un corps solide et on ne peut concevoir un nombre limité de degrés de liberté interne. Mais pour la particule ponctuelle cette difficulté disparaît et on peut doter cette dernière d'une structure interne très complexe sans que le problème de la disposition spatiale des tourbillons locaux apparaisse. Cependant, comme l'ont montré D. Bohm et J. P. Vigié [1], un mouvement de rotation ayant une *réalité* physique est obligatoirement lié à la présence de deux points (centre de masse et centre de matière), même si ce mouvement peut se décrire ponctuellement. C'est de cette idée que nous partirons pour élargir le concept de rotation interne à un fluide relativiste. Nous montrerons d'abord que

les descriptions déjà faites de rotations internes dans des particules ponctuelles sont en réalité des mouvements à deux points, puis nous écrirons une condition physique liant ces deux points. Enfin, étendant notre définition bi-ponctuelle d'un mouvement de rotation interne, nous supposerons qu'un fluide en équilibre est tel que la condition physique liant les deux points s'étend à toutes les « molécules » du fluide, prise deux à deux et suivies le long de leur trajet d'espace temps.

Cet article reste entièrement classique, dans le cadre de la relativiste restreinte. Nous utilisons les coordonnées de Minkowski, avec $c = 1$, $x_4 = it$.

* *

I. Définition du rotateur relativiste. Son origine physique. — Il est classique de décrire un fluide relativiste par la donnée d'un tenseur énergie-impulsion symétrique $T_{\mu\nu}$, obéissant aux équations du mouvement $\partial_\nu T_{\mu\nu} = 0$. Un tel tenseur permet

de définir un « centre de masse » animé d'un mouvement rectiligne uniforme, et une impulsion p_μ constante du mouvement. On pose

$$p_\mu = -i \int T_{\mu 4} dv \quad (1)$$

$$\mathcal{M}_{\mu\nu} = -i \int [(x_\mu - Y_\mu) T_{\nu 4} - (x_\nu - Y_\nu) T_{\mu 4}] dv \quad (2)$$

x_α est la variable d'intégration, Y_α est un point de l'espace-temps où nous calculons $\mathcal{M}_{\mu\nu}(Y)$. Les intégrations précédentes sont faites sur un hyperplan $t = \text{constante}$, mais il est facile de démontrer que les quantités p_μ et $\mathcal{M}_{\mu\nu}$ ne dépendent pas de la surface d'intégration, à cause de la loi de conservation $\partial_\nu T_{\mu\nu} = 0$ (cf. Möller [2]). La même loi de conservation conduit à

$$\dot{p}_\mu = 0 \quad (3)$$

$$\dot{\mathcal{M}}_{\mu\nu} = p_\mu v_\nu - p_\nu v_\mu \quad (4)$$

où \dot{A} désigne la dérivée le long de la ligne de courant suivie par Y_μ , $\dot{A} = dA/dt$ et $v_\mu = dY_\mu/dt$, avec la relation supplémentaire $v_\mu v_\mu = -1$.

On voit qu'à chaque point Y_α d'un fluide relativiste on peut associer une vitesse v_μ , une impulsion p_μ , la même pour tous les points ; un tenseur antisymétrique $\mathcal{M}_{\mu\nu}$, généralisation du mouvement cinétique de la mécanique classique. Mais on peut encore associer à chaque point Y_α d'autres quantités importantes, [3] qui sont

$$\mathcal{M}_{\mu\nu} p_\nu = m'^2 R_\mu \quad m'^2 = -p_\mu p_\mu \quad (5)$$

$$\tilde{\mathcal{M}}_{\mu\nu} p_\nu = m' S_\mu \quad \tilde{\mathcal{M}}_{\mu\nu} = -(i/2) \varepsilon_{\mu\nu\lambda\kappa} \mathcal{M}_{\lambda\kappa} \quad (6)$$

$$\mathcal{M}_{\mu\nu} v_\nu = m t_\mu \quad m = -\Gamma_\alpha v_\alpha \quad (7)$$

$$\tilde{\mathcal{M}}_{\mu\nu} v_\nu = s_\mu \quad (8)$$

R_μ et S_μ sont directement liés au centre de masse que nous voulons définir. R_μ désigne le vecteur joignant le point Y_α au lieu de ce centre de masse, l'axe central, qui est une droite parallèle à l'impulsion p_μ . Si C_ν désigne le centre de masse, on montre que l'on a $C_\nu = Y_\nu - R_\nu$. Il suffit d'écrire en effet :

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{\mu\nu} p_\nu &= -ip_\nu \int (x_\mu T_{\nu 4} - x_\nu T_{\mu 4}) dv \\ &+ i \left(p_\nu \int T_{\nu 4} dv \right) Y_\mu - i(p_\nu Y_\nu) \int T_{\mu 4} dv. \end{aligned} \quad (9)$$

Soit en utilisant (1)

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{\mu\nu} p_\nu &= -ip_\nu \int (x_\mu T_{\nu 4} - x_\nu T_{\mu 4}) dv \\ &- Y_\mu (p_\alpha p_\alpha) + p_\mu (p_\alpha Y_\alpha). \end{aligned} \quad (10)$$

Cette équation s'interprète facilement : appelons Π_0 l'hyperplan perpendiculaire à p_α et passant par Y_α . Dans cet hyperplan $p_\alpha Y_\alpha$ est une constante. Il en est de même de la quantité sous le

signe \int qui ne fait pas intervenir le point Y_α . Posons maintenant $R_\mu - Y_\mu = -C_\mu$, il vient, en utilisant (10)

$$\begin{aligned} R_\mu - Y_\mu &= -ip_\nu \int (x_\mu T_{\nu 4} - x_\nu T_{\mu 4}) dv \\ &+ p_\mu (p_\alpha Y_\alpha) = -C_\mu \end{aligned} \quad (11)$$

C_μ est donc le même pour tous les points Y_α de l'hyperplan Π_0 . Lorsque Π_0 se déplace parallèlement à lui-même, on voit facilement que C_μ décrit une droite (l'axe central) qui est le lieu du centre de masse de D. Bohm et J. P. Vigier [1]. R_μ apparaît comme le vecteur d'origine le centre de masse, d'extrémité le point courant, dans cet hyperplan.

On montre de plus que S_μ , au même titre que p_μ , est une constante du mouvement [3].

Si S_μ et R_μ , de par leur définition, sont des quantités globales, qui décrivent une propriété unique du fluide, la rotation autour de l'axe central, les quantités t_μ et s_μ sont en revanche des quantités locales liées en particulier à la vitesse unitaire. On peut d'ailleurs lier t_μ et s_μ locaux à leurs homologues globaux sous des formules qui ressemblent aux théorèmes de Koenig. On utilise pour cela l'expression de \dot{R}_μ

$$\begin{aligned} m'^2 \dot{R}_\mu &= \dot{\mathcal{M}}_{\mu\nu} p_\nu = m'^2 [v_\mu - (m/m') \Gamma_\mu] \\ \text{d'où} \end{aligned} \quad (12)$$

$$\mathcal{M}_{\mu\nu} \dot{R}_\nu = m(t_\mu - R_\mu) \quad (13)$$

$$\tilde{\mathcal{M}}_{\mu\nu} \dot{R}_\nu = s_\mu - (m/m') S_\mu \quad (14)$$

On peut interpréter s_μ comme le moment cinétique pris en un point quelconque de la masse fluide, $\frac{m}{m'} S_\mu$ comme le moment cinétique pris au centre de la gravité. $\tilde{\mathcal{M}}_{\mu\nu} \dot{R}_\nu$ est en effet, dans le repère Π_0 , le moment cinétique de rotation du point Y_α tournant autour de C_α avec la masse m' . Suivant Takabayasi [4], qui nomme impulsion la quantité p_μ , nous appellerons m' la masse au repos apparente, m la masse au repos vraie.

Il est possible de définir un autre point que le centre de masse C_α , qui donne une idée du mouvement tourbillonnaire de la masse fluide. C'est le centre de densité de matière (1), à partir de la donnée d'un flux de courant j_μ conservatif, $\partial_\mu j_\mu = 0$. Mais le centre de densité de matière n'est défini que dans un repère bien particulier, ce n'est pas une donnée covariante.

$$X_\mu^0 \left\{ \int j_\mu^0 dv_0 \right\} = \int x_\mu^0 j_\mu^0 dv_0 \quad (15)$$

Cette définition est analogue à celle du centre de masse

$$C_\mu \left\{ \int t_\mu^0 dv_0 \right\} = \int x_\mu^0 t_\mu^0 dv_0 \quad (16)$$

Les intégrations sont faites dans le repère Π_0 . Mais alors qu'on peut donner par (11) une définition covariante du centre de masse (on démontre facilement l'équivalence entre les équations (11) et (16)), il n'est pas possible de le faire pour le centre de densité de matière. Son sens physique est cependant précis. Le mouvement moyen de la masse fluide ne peut-être décrit par un seul point, car l'observateur placé dans le repère propre de ce point n'aurait aucun moyen de connaître son mouvement de rotation. Au contraire, s'il en voit un autre, il sera sensible à ses variations angulaires et en distance. Un cas bien étudié jusqu'alors a été le mouvement de Weyssenhoff, qui correspond à la condition supplémentaire $t_\mu = 0$. Dans ce cas le centre de masse et le centre matière sont animés l'un autour de l'autre du même mouvement de rotation pure, avec même vitesse angulaire.

Nous en arrivons maintenant à la définition d'un rotateur relativiste, qui découle tout naturellement des données précédentes. C'est une particule ponctuelle animée d'une impulsion constante (conservation de l'énergie impulsion), et d'un moment cinétique $\mathcal{M}_{\mu\nu}$ tel que $\mathcal{M}_{\mu\nu} = p_\mu v_\nu - p_\nu v_\mu$ (conservation du moment cinétique). Cette particule est encore définie soit par la donnée de $p_\mu, R_\mu, S_\mu, v_\mu$, soit par la donnée de $p_\mu, t_\mu, s_\mu, v_\mu$. Donc par quatre quantités vectorielles, dont une longueur t_μ ou R_μ : on a ainsi la donnée de deux points, et nous allons montrer que le mouvement de l'un par rapport à l'autre est caractéristique des propriétés dites internes du premier point, soit p_μ et s_μ .

II. Description du mouvement relatif de deux points. — Avant de passer à l'étude que nous avons définie dans le § I, nous allons établir une formule permettant de lier entre eux les mouvements de deux points sur leurs lignes de courant respectives. Nous allons pour cela introduire un tenseur antisymétrique $\omega_{\alpha\beta}$, qui est la généralisation relativiste des vitesses angulaires, comme nous le verrons plus loin.

Nous attachons à chaque position de la trajectoire du point matériel envisagé un ensemble de quatre vecteurs orthonormés (vierbein) $b_\mu^{(\xi)}$ où (ξ) désigne l'un des quatre vecteurs ($\xi = 1, 2, 3, 4$), et μ sa $\mu^{\text{ème}}$ projection sur les axes du laboratoire. Les 16 quantités $b_\mu^{(\xi)}$ ainsi définies sont liées par 10 relations d'orthonormalisation.

$$b_\mu^{(\xi)} b_\nu^{(\xi)} = \delta_{\mu\nu} \quad b_\mu^{(\xi)} b_\mu^{(\eta)} = \delta_{\xi\eta} \quad (1)$$

On a donc affaire à 6 paramètres arbitraires fonction de τ , le temps propre du point matériel parcourant sa ligne de courant. Cette variation du repère mobile (que par la suite nous confondrons avec le repère propre du point en alignant $b_\mu^{(4)}$ et v_μ) peut-être caractérisée par les différentes vitesses

cinématiques $\frac{d}{d\tau}(b^{(\xi)})$. Appelons $\omega_{\mu\nu}$ la projection de la vitesse du μ ième axe du laboratoire l^μ sur le ν ième, vitesse prise évidemment par rapport au repère mobile. On a

$$I^\mu = b_\mu^{(\xi)} b^{(\xi)} \quad (2)$$

d'où en dérivant par rapport au temps propre des $b_\mu^{(\xi)}$, et en gardant les axes $b^{(\mu)}$ fixes

$$\dot{I}^\mu = \dot{b}_\mu^{(\xi)} b^{(\xi)} \quad (3)$$

d'où

$$\omega_{\mu\nu} = \dot{b}_\mu^{(\xi)} b^{(\xi)} \cdot b_\nu^{(\eta)} b^{(\eta)} \quad (4)$$

$$\omega_{\mu\nu} = \dot{b}_\mu^{(\xi)} b_\nu^{(\xi)} = \frac{1}{2} (\dot{b}_\mu^{(\xi)} b_\nu^{(\xi)} - \dot{b}_\nu^{(\xi)} b_\mu^{(\xi)}) \quad (5)$$

à cause des relations d'orthonormalisation

$$b_\mu^{(\xi)} b_\nu^{(\xi)} = \delta_{\mu\nu}.$$

On pourrait tout aussi bien utiliser les vitesses angulaires du repère mobile par rapport au repère du laboratoire ; on trouverait alors

$$\omega^{\mu\nu} = \dot{b}_\xi^{(\mu)} b_\xi^{(\nu)}. \quad (6)$$

Considérons maintenant un autre point matériel X décrivant une autre trajectoire que la précédente, avec le temps propre θ . Nous allons décrire le mouvement de X dans le repère $b_\mu^{(\xi)}$. v_μ désignera la vitesse unitaire de M , ω_μ celle de X . On se donne en plus une fonction arbitraire $\tau = f(\theta)$ telle qu'à un repère $b_\mu^{(\xi)}$ correspondent deux points bien définis M et X sur leur ligne de courant respective. Ces lignes de courant étant supposées des trajectoires réelles, il suffira par exemple de prendre M et X au même temps physique t .

Posons $MX = K = K_\mu I^\mu$. On a

$$X = M + MX. \quad (7)$$

Dérivant sous cette forme par rapport au temps propre τ , on fait apparaître les vitesses unitaires v_μ et ω_μ . Il vient

$$\frac{dX}{d\tau} = \frac{d\theta}{d\tau} \omega_\mu I^\mu = \frac{cM}{d\tau} + \frac{d}{d\tau} MX \quad (8)$$

$$\frac{cM}{d\tau} = v_\mu I^\mu \quad MX = K_\mu I^\mu = K'_\xi b_\mu^{(\xi)} I^\mu. \quad (9)$$

Nous notons par le signe prime les projections sur les axes mobiles, et nous utilisons les formules de transformation du repère mobile au repère fixe, et inversement, qui sont :

$$K_\mu = K'_\xi b_\mu^{(\xi)} \quad K'_\xi = b_\mu^{(\xi)} K_\mu \quad (10)$$

d'où le calcul suivant :

$$\begin{aligned} \frac{dMX}{d\tau} &= \frac{d}{d\tau} (K'_\xi b_\mu^{(\xi)}) \cdot I^\mu = \left(b_\mu^{(\xi)} \frac{d}{d\tau} K'_\xi + K'_\xi b_\nu^{(\xi)} \dot{b}_\mu^{(\xi)} \right) I_\mu \\ &= \left(b_\mu^{(\xi)} \frac{d}{d\tau} K'_\xi + \omega_{\mu\nu} K'_\nu \right) I_\mu. \end{aligned} \quad (11)$$

Comparant (8), (9) et (11) et revenant à la notation tensorielle, il vient :

$$\frac{d\theta}{d\tau} \alpha_\mu = v_\mu + \omega_{\mu\nu} K_\nu + l_\mu^{(\xi)} \frac{d}{d\tau} K'_\xi. \quad (12)$$

Tels que nous avons fixés les $\omega_{\mu\nu}$, c'est-à-dire absolument indépendants du contexte physique, cette formule n'est pas une définition de la rotation instantanée d'une ligne par rapport à l'autre. Cela ne sera que s'il est possible d'imposer à $\omega_{\mu\nu}$ six conditions physiques simples. Pour le corps solide de la mécanique classique, l'on sait que l'on a une formule analogue à (12), mais où le dernier terme est nul. Cherchons dès maintenant la signification de l'annulation de ce dernier terme. Partons de l'expression $K'_\xi = b_\alpha^{(\xi)} K_\alpha$ et dérivons par rapport à τ , puis saturons par $b_\mu^{(\xi)}$, il vient :

$$\dot{K}'_\xi b_\mu^{(\xi)} = \dot{K}_\mu + \omega_{\nu\mu} K_\nu. \quad (13)$$

La condition cherchée est donc

$$\dot{K}_\mu = \omega_{\mu\nu} K_\nu. \quad (14)$$

Elle signifie que la distance $K_\mu K_\nu$ est constante. Réciproquement, si cette condition est réalisée ($K_\nu \dot{K}_\nu = 0$), il existe $\omega_{\mu\nu}$ tel que le dernier terme de (12) s'annule. Remarquons simplement pour le moment que cette condition apparente l'ensemble des deux points à un corps solide.

III. Étude de $\omega_{\mu\nu}$ dans le cas général. — Le point courant M est défini par les quantités $p_\mu, s_\mu, t_\mu, v_\mu$. Nous y adjoignons un second rotateur relativiste simple, le point X , de vitesse w_μ , tel que

$$X_\nu = Y_\nu - t_\nu \quad (1)$$

τ sera le temps propre de $M(Y_\nu)$, θ celui de X . En utilisant II (12) il vient :

$$\frac{d\theta}{d\tau} \alpha_\mu = v_\mu - \omega_{\mu\nu} t_\nu - l_\mu^{(\xi)} \frac{d}{d\tau} t'_\xi. \quad (2)$$

La dérivation de (1) donne aussi

$$\frac{d\theta}{d\tau} \alpha_\mu = v_\mu - \dot{t}_\mu \quad (3)$$

qui entraîne, en saturant par v_μ, p_μ et en élevant au carré, les formules suivantes, que nous aurons à utiliser

$$(d\theta/d\tau) \alpha_\alpha v_\alpha = -1 - \dot{t}_\alpha v_\alpha = -1 + \dot{v}_\alpha t_\alpha \quad (4)$$

$$-\frac{d\theta}{d\tau} p_\alpha \alpha_\alpha = m + \dot{t}_\alpha p_\alpha = \mu(d\theta/d\tau) \quad (5)$$

$$\mu = -p_\alpha \omega_\alpha \quad (6)$$

$$-(d\theta/d\tau)^2 = -1 - 2v_\alpha \dot{t}_\alpha + \dot{t}_\alpha \dot{t}_\alpha. \quad (7)$$

Nous poserons en outre

$$-b_\mu^{(\xi)} \frac{d}{d\tau} t'_\xi = A_\mu. \quad (8)$$

Introduisons la distance de X à l'axe central, ce sera, d'après (1)

$$I_\mu^{(2)} = P_\mu - \text{Proj}_\mu(t_\alpha) \quad (9)$$

où $\text{Proj}_\mu(t_\alpha)$ représente la projection de t_μ sur un plan perpendiculaire à p_μ . On a, en posant $p_\mu = m'u_\mu$ ($u_\alpha u_\alpha = -1$)

$$\text{Proj}_\mu(t_\alpha) = (\delta_{\mu\nu} + u_\mu u_\nu) t_\nu = t_\mu + (u_\alpha t_\alpha) u_\mu \quad (10)$$

$$I_\mu^{(2)} = P_\mu - t_\mu - (u_\alpha t_\alpha) u_\mu. \quad (11)$$

Si on définit pour le point adjoint X un tenseur antisymétrique $M_{\alpha\beta}$ qui rapporte ce point au même axe central que M , on aura donc

$$M_{\alpha\beta} = p_\alpha I_\beta^{(2)} - p_\beta I_\alpha^{(2)} + \frac{i}{m} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma\lambda} S_\gamma p_\lambda. \quad (12)$$

Soit en utilisant la valeur de $\mathcal{M}_{\alpha\beta}$ (tenseur antisymétrique de M rapporté au même axe central)

$$M_{\alpha\beta} = \mathcal{M}_{\alpha\beta} - (p_\alpha t_\beta - p_\beta t_\alpha). \quad (13)$$

Par la suite, nous considérons que, physiquement, p_μ et S_μ représentent les propriétés communes aux points X et M . Ainsi nous appellerons masses au repos vraies les quantités $m = -p_\alpha v_\alpha$, $\mu = -p_\alpha w_\alpha$. Ce seront les masses dont nous affecterons les points X et M lorsque nous les considérons comme deux points conjugués au sens de Yukawa (théorie de la bilocalité).

Les 16 paramètres $b_\mu^{(\xi)}$ sont liés par 10 relations $b_\mu^{(\xi)} b_\nu^{(\xi)} = \delta_{\mu\nu}$. On peut donc fixer 6 conditions qui doivent contribuer à donner un sens physique à (2). On est d'abord conduit à aligner $b_\mu^{(4)}$ avec la vitesse propre de Y .

D'où 3 conditions

$$t_\mu^{(4)} = -iv_\mu \quad (14)$$

$\omega_{\mu\nu}$ et $\tilde{\omega}_{\mu\nu}$ ont alors la forme suivante, si on pose $\tilde{\omega}_{\kappa\lambda} v_\lambda = \varphi_\kappa$

$$\omega_{\mu\nu} = v_\mu \dot{v}_\nu - \dot{v}_\mu v_\nu - i\varepsilon_{\mu\nu\kappa\lambda} v_\kappa \varphi_\lambda \quad (15)$$

$$\tilde{\omega}_{\mu\nu} = v_\mu \varphi_\nu - v_\nu \varphi_\mu - i\varepsilon_{\mu\nu\kappa\lambda} v_\kappa \dot{v}_\lambda \quad (16)$$

Nous sommes conduits, en utilisant des résultats de mécanique classique, à considérer que l'énergie de rotation de la masse fluide est le produit d'un terme de vitesse angulaire par un terme de moment cinétique $T = \frac{1}{2} (\bar{I} \cdot \bar{\omega}) \bar{\omega}$. Ici nous prendrons pour $\bar{I} \cdot \bar{\omega} : \frac{1}{2} \mathcal{M}_{\alpha\beta}$ (ou $M_{\alpha\beta}$), pour $\bar{\omega} : \omega_{\alpha\beta}$. Nous introduirons donc deux énergies de rotation

$$T_1 = \frac{1}{4} \mathcal{M}_{\alpha\beta} \omega_{\alpha\beta} \quad (17)$$

$$T_2 = \frac{1}{4} M_{\alpha\beta} \omega_{\alpha\beta}.$$

Nous avons déjà étudié [5] des termes d'énergie

analogues, dans le cas du mouvement de Weyssenhoff. Nous avons alors trouvé $T = m/2$. Ici deux raisons vont nous conduire à adopter la même valeur pour T_2 . On remarque d'abord que X a exactement un mouvement à la Weyssenhoff dans le repère propre de M (il est facile de montrer que $M_{\alpha\beta} v_\beta = 0$). D'une façon générale on peut donc associer à tout point un point qui ait autour du premier un mouvement satisfaisant aux équations de Weyssenhoff. D'autre part nous supposons que les points X et Y sont conjugués, la vitesse de l'un étant l'impulsion de l'autre. T_1 représente alors l'énergie du point Y , de vitesse v_α , d'impulsion $\mu\omega_\alpha \left(\frac{d\theta}{d\tau}\right)^2$, T_2 l'énergie de X , de vitesse $\omega_\alpha d\theta/d\tau$, d'impulsion mv_α , d'où deux conditions supplémentaires (nous ne ferons pas intervenir le facteur $v_\alpha \omega_\alpha d\theta/d\tau$, pour rendre les expressions plus simples).

$$T_1 = (1/2) \mu d\theta/d\tau \qquad T_2 = m/2, \tag{18}$$

Pour calculer T_1 et T_2 , nous utilisons l'expression de $\mathcal{M}_{\alpha\beta}$ en fonction de p_μ, v_μ, s_μ .

$$\begin{cases} \mathcal{M}_{\mu\nu} = i\varepsilon_{\mu\nu\lambda} s_\lambda v_\lambda + m(t_\nu v_\mu - t_\mu v_\nu) \\ \bar{\mathcal{M}}_{\mu\nu} = s_\nu v_\mu - s_\mu v_\nu + im\varepsilon_{\mu\nu\lambda} t_\lambda v_\lambda. \end{cases} \tag{19}$$

Il vient alors, pour T_1 et T_2

$$\begin{aligned} T_1 &= \frac{1}{4} \mathcal{M}_{\alpha\beta} \omega_\alpha \omega_\beta = \frac{1}{2} [m\dot{t}_\alpha v_\alpha + \varphi_\lambda s_\lambda] \\ T_2 &= \frac{1}{4} \bar{\mathcal{M}}_{\alpha\beta} \omega_\alpha \omega_\beta = \frac{1}{2} [m\dot{t}_\alpha v_\alpha + \varphi_\lambda s_\lambda] + \frac{1}{2} \omega_{\mu\nu} p_\nu t_\mu. \end{aligned} \tag{20}$$

D'où la valeur de $\varphi_\lambda s_\lambda$ en fonction des données ; ainsi que de $\omega_{\mu\nu} p_\nu t_\mu$

$$\varphi_\lambda s_\lambda = \mu(d\theta/d\tau) - m\dot{t}_\alpha v_\alpha = m + (p_\alpha - mv_\alpha) \dot{t}_\alpha \tag{21}$$

$$\omega_{\mu\nu} t_\nu p_\mu = m - \mu(d\theta/d\tau) = p_\alpha \dot{t}_\alpha. \tag{22}$$

Reprenons l'expression (2) pour voir ce qu'entraînent pour la quantité $A_\mu = -b_\mu^{(\xi)} \frac{d}{d\tau} t'_\xi$ les hypothèses précédentes. Il suffit de saturer (2) respectivement par v_μ, p_μ, t_μ , ce qui donne :

$$\begin{aligned} (d\theta/d\tau) \omega_\alpha v_\alpha + 1 + \omega_{\mu\nu} t_\nu v_\mu &= A_\mu v_\mu \\ (d\theta/d\tau) \omega_\alpha p_\alpha - v_\alpha p_\alpha + \omega_{\mu\nu} t_\nu p_\mu &= A_\mu p_\mu \\ (d\theta/d\tau) \omega_\alpha t_\alpha &= A_\mu t_\mu. \end{aligned} \tag{23}$$

Soit encore, en utilisant les équations (3), (4), (15), (22)

$$\begin{aligned} A_\mu v_\mu &= A_\mu p_\mu = 0 \\ A_\mu t_\mu &= -t_\alpha \dot{t}_\alpha. \end{aligned} \tag{24}$$

On est alors tout naturellement conduit à poser comme 6^e condition

$$A_\mu \omega_\mu = A_\mu \dot{t}_\mu = 0 \tag{25}$$

condition qui conduit à étendre la symétrie imposée aux deux points X et Y par les équations (20). A_μ est un vecteur du genre espace qui est perpendiculaire à toutes les vitesses données, $p_\alpha, v_\alpha, \omega_\alpha$.

La dernière relation permet de trouver l'expression de $\omega_{\mu\nu} t_\nu \dot{t}_\mu$

$$(d\theta/d\tau) \omega_\alpha \dot{t}_\alpha - v_\alpha \dot{t}_\alpha + \omega_{\mu\nu} \dot{t}_\mu t_\nu = 0 \tag{26}$$

$$\omega_{\mu\nu} t_\nu \dot{t}_\mu = \dot{t}_\alpha \dot{t}_\alpha. \tag{27}$$

Nous allons commencer par calculer le vecteur $\omega_{\mu\nu} t_\nu = \Omega_\mu$, qui est entièrement défini par les relations (23) et (27), soit :

$$\begin{aligned} \Omega_\alpha v_\alpha &= \dot{t}_\alpha v_\alpha \\ \Omega_\alpha p_\alpha &= \dot{t}_\alpha p_\alpha \\ \Omega_\alpha t_\alpha &= \dot{t}_\alpha \dot{t}_\alpha \\ \Omega_\alpha t_\alpha &= 0. \end{aligned} \tag{28}$$

Les trois premières de ces équations permettent d'écrire Ω_α sous la forme d'un vecteur égal à \dot{t}_α plus un vecteur perpendiculaire à $v_\alpha, p_\alpha, \dot{t}_\alpha$ soit

$$\Omega_\alpha = \dot{t}_\alpha + im \Omega \varepsilon_{\alpha\mu\nu\rho} v_\mu p_\nu \dot{t}_\rho \tag{29}$$

La dernière relation $\Omega_\alpha \dot{t}_\alpha = 0$ permettant de fixer l'unique inconnue Ω

$$\Omega_\alpha \dot{t}_\alpha = 0 = \dot{t}_\alpha \dot{t}_\alpha + im \Omega \varepsilon_{\alpha\mu\nu\rho} v_\mu p_\nu \dot{t}_\rho \dot{t}_\alpha \tag{30}$$

$m\dot{t}_\rho$ se calcule facilement à partir des expressions I (4) et I (7)

$$\begin{aligned} m\dot{t}_\rho &= -\dot{m}t_\rho + mv_\rho(t_\lambda \dot{v}_\lambda + 1) - p_\rho \\ &\quad + i\varepsilon_{\rho\alpha'\mu'\nu'} \dot{v}_{\alpha'} s_{\mu'} \dot{v}_{\nu'}. \end{aligned} \tag{31}$$

Si on porte cette expression dans (30), seul subsiste le dernier terme de (31), à cause de l'orthogonalité de $(\Omega_\alpha - \dot{t}_\alpha)$ à $t_\alpha, p_\alpha, v_\alpha$, soit :

$$0 = \dot{t}_\alpha \dot{t}_\alpha + \Omega \varepsilon_{\rho\alpha\mu\nu} \varepsilon_{\rho\alpha'\mu'\nu'} t_\alpha \dot{v}_{\alpha'} v_\mu s_{\mu'} p_\nu v_{\nu'}. \tag{32}$$

On symbolise $\varepsilon_{\rho\alpha\mu\nu} \varepsilon_{\rho\alpha'\mu'\nu'}$ par $\delta_{\alpha\mu\nu}^{\alpha'\mu'\nu'}$, qui est égal à 0 si les groupes $\alpha\mu\nu, \alpha'\mu'\nu'$ sont globalement différents, à ± 1 si on passe de l'un à l'autre de ces groupes par une permutation paire ou impaire. On aura donc à considérer, avec les signes adéquats, les permutations

$$\begin{array}{lll} \alpha\mu\nu = \alpha'\mu'\nu' & + & (t_\alpha \dot{v}_\alpha) (t_\mu s_\mu) (p_\nu v_\nu) = 0 \\ \alpha\mu\nu = \mu'\alpha'\nu' & - & (t_\alpha s_\alpha) (t_\mu \dot{v}_\mu) (p_\nu v_\nu) = 0 \\ \alpha\mu\nu = \mu'\nu'\alpha' & + & (t_\alpha s_\alpha) (t_\mu v_\mu) (p_\nu \dot{v}_\nu) \\ \alpha\mu\nu = \nu'\mu'\alpha' & - & (t_\alpha v_\alpha) (v_\mu s_\mu) (p_\nu v_\nu) = 0 \\ \alpha\mu\nu + \nu'\alpha'\mu' & + & (t_\alpha v_\alpha) (v_\mu \dot{v}_\mu) (p_\nu s_\nu) = 0 \\ \alpha\mu\nu = \alpha'\nu'\mu' & - & (t_\alpha \dot{v}_\alpha) (v_\mu v_\mu) (p_\nu s_\nu). \end{array}$$

Soit :

$$\Omega \{ (t_\alpha \dot{v}_\alpha) (p_\alpha s_\alpha) - (t_\alpha s_\alpha) (p_\alpha \dot{v}_\alpha) \} = -t_\alpha \dot{t}_\alpha. \tag{33}$$

Pour calculer φ_λ , nous utiliserons la valeur de Ω_λ qui le contient, soit

$$\Omega_\lambda = \omega_{\lambda\nu} t_\nu = v_\lambda (\dot{t}_\alpha t_\alpha) - i \varepsilon_{\lambda\alpha\beta\gamma} v_\beta \varphi_\gamma t_\alpha \quad (34)$$

et nous égalons cette quantité à (29). Il suffit de multiplier par $i \varepsilon_{\mu\nu\lambda\rho} s_\mu v_\nu$ pour faire apparaître φ_λ que l'on cherche. En effet l'on a, par un calcul semblable au précédent

$$\varepsilon_{\lambda\alpha\beta\gamma} \varepsilon_{\lambda\mu\nu\rho} v_\beta \varphi_\gamma t_\alpha s_\mu v_\nu = t_\rho (\varphi_\alpha s_\alpha) - (t_\alpha s_\alpha) \varphi_\rho \quad (35)$$

où $\varphi_\alpha s_\alpha$ est donnée par (21).

L'équation qui donne directement φ_λ s'écrit alors

$$i \varepsilon_{\mu\nu\lambda\rho} s_\mu v_\nu \Omega_\lambda = \varepsilon_{\lambda\alpha\beta\gamma} \varepsilon_{\lambda\mu\nu\rho} v_\beta \varphi_\gamma t_\alpha s_\mu v_\nu \\ = t_\rho (\varphi_\alpha s_\alpha) - \varphi_\rho (t_\alpha s_\alpha). \quad (36)$$

Soit, en exprimant $i \varepsilon_{\lambda\mu\nu\rho} s_\mu v_\nu$ en fonction de $\mathcal{M}_{\lambda\rho}$, s_λ , v_λ

$$(\mathcal{M}_{\lambda\rho} - m t_\rho v_\lambda + m t_\lambda v_\rho) \Omega_\lambda = t_\rho (\varphi_\alpha s_\alpha) - \varphi_\rho (t_\alpha s_\alpha). \quad (37)$$

Reste à utiliser l'expression (21) de $\varphi_\alpha s_\alpha$, et on obtient une relation simple entre φ_ρ et Ω_λ

$$(t_\alpha s_\alpha) \varphi_\rho = \mathcal{M}_{\rho\lambda} \Omega_\lambda + \mu (d\theta/d\tau) t_\rho. \quad (38)$$

Le calcul de $\mathcal{M}_{\rho\lambda} \Omega_\lambda$ en fonction des données initiales est un peu plus laborieux. On a

$$\mathcal{M}_{\rho\lambda} \Omega_\lambda = \Omega_\lambda (m t_\lambda v_\rho - m t_\rho v_\lambda + i \varepsilon_{\rho\lambda\mu\nu} s_\mu v_\nu) \\ = m (\dot{t}_\alpha t_\alpha) t_\rho + i \Omega_\lambda \varepsilon_{\rho\lambda\mu\nu} s_\mu v_\nu \quad (39)$$

$$\varepsilon_{\rho\lambda\mu\nu} s_\mu v_\nu \Omega_\lambda = \varepsilon_{\rho\lambda\mu\nu} \dot{t}_\lambda s_\mu v_\nu \\ + i m \Omega \varepsilon_{\rho\lambda\mu\nu} \varepsilon_{\lambda\alpha\beta\gamma} v_\alpha p_\beta \dot{t}_\gamma s_\mu v_\nu. \quad (40)$$

Le second terme du second membre de (40) se calcule encore de la même façon que plus haut, il vient

$$i m \Omega \varepsilon_{\rho\lambda\mu\nu} \varepsilon_{\lambda\alpha\beta\gamma} v_\alpha p_\beta \dot{t}_\gamma s_\mu v_\nu \\ = i m \Omega [\dot{t}_\rho (p_\alpha s_\alpha) - p_\rho (\dot{t}_\alpha s_\alpha) + v_\rho (p_\alpha s_\alpha) (\dot{t}_\lambda v_\lambda) + m \dot{t}_\lambda s_\lambda] \quad (41)$$

$$i \varepsilon_{\rho\lambda\mu\nu} s_\mu v_\nu \Omega_\lambda = \mathcal{M}_{\rho\lambda} \dot{t}_\lambda - v_\rho \{ m (t_\alpha \dot{t}_\alpha) - m \Omega (p_\alpha s_\alpha) (\dot{t}_\alpha v_\alpha) \\ - m^2 \Omega t_\alpha s_\alpha \} - m \Omega [\dot{t}_\rho (p_\alpha s_\alpha) - p_\rho (\dot{t}_\alpha s_\alpha)] + m t_\rho (v_\lambda \dot{t}_\lambda). \quad (42)$$

Pour simplifier cette équation, on peut utiliser la valeur de Ω , qui s'écrit encore suivant (44), compte tenu de ce que, en saturant (31) par s_α , on obtient (43).

$$m (\dot{t}_\alpha s_\alpha) + m (t_\alpha s_\alpha) = - t_\alpha s_\alpha \quad (43)$$

$$\Omega [(t_\alpha \dot{v}_\alpha) (p_\alpha s_\alpha) - p_\alpha s_\alpha - m (t_\alpha s_\alpha)] = - \dot{t}_\alpha t_\alpha \quad (44)$$

d'où

$$m v_\rho \{ t_\alpha \dot{t}_\alpha - \Omega [(p_\alpha s_\alpha) (\dot{t}_\alpha v_\alpha) + m (t_\alpha s_\alpha)] \} = m (p_\alpha s_\alpha) v_\rho. \quad (45)$$

L'équation (39) se simplifie alors beaucoup, et il reste

$$\mathcal{M}_{\rho\lambda} \Omega_\lambda = \mathcal{M}_{\rho\lambda} \dot{t}_\lambda - m (p_\alpha s_\alpha) v_\rho - m \Omega [\dot{t}_\rho (p_\alpha s_\alpha) - p_\rho (\dot{t}_\alpha s_\alpha)]. \quad (45)$$

Nous allons maintenant tirer de cette équation une expression plus simple que (33), pour Ω . $\varphi_\lambda v_\lambda = 0$ entraîne, en repartant de (38), et en prenant pour $\mathcal{M}_{\rho\lambda} \Omega_\lambda$ la valeur ci-dessus

$$0 = m (t_\alpha \dot{t}_\alpha) + m (p_\alpha s_\alpha) + m \Omega [(t_\alpha \dot{v}_\alpha) (p_\alpha s_\alpha) - m (t_\alpha s_\alpha)]. \quad (46)$$

Utilisons encore une fois (43) pour simplifier le facteur de Ω il vient :

$$0 = m (t_\alpha \dot{t}_\alpha) + m (p_\alpha s_\alpha) \\ + m \Omega [(t_\alpha \dot{v}_\alpha) (p_\alpha s_\alpha) + m (t_\alpha s_\alpha) + p_\alpha s_\alpha]. \quad (47)$$

Si on utilise l'expression (33) de Ω il vient :

$$\Omega = -1. \quad (48)$$

IV. Cas de la bi-ponctualité réciproque. — Dans le paragraphe précédent nous avons utilisé pour fixer les valeurs de l'énergie, la notion de réciprocity entre les deux points X et M . En fait, nous n'avons guère poussé cette question, supposant simplement qu'elle se limitait à l'énergie (à l'impulsion). Mais, tels que nous avons les avons fixé dans le paragraphe précédent, si la donnée de M donne X , inversement, la donnée de X , considéré lui aussi comme un rotateur relativiste (p_μ , w_μ , $M_{\mu\nu} w_\nu$, $\tilde{M}_{\mu\nu} w_\nu$), ne donne pas M . Il suffit d'ailleurs, pour s'en assurer, de remarquer que t_α , le vecteur joignant X à M , n'est pas perpendiculaire à w_α , donc n'est pas parallèle à $M_{\alpha\nu} w_\nu$.

Une bonne définition du rotateur relativiste « pur », et qui mène à l'étude d'une classe de mouvements, qui généralisent immédiatement le mouvement de Weyssenhoff, est donc de considérer les deux points comme réciproques en tant que rotateurs relativistes ($p_\mu^1 = p_\mu^2$, $s_\mu^1 = s_\mu^2$, $t_\mu^1 = -t_\mu^2$) ce qui, joint à la condition de réciprocity énergétique comme nous l'avons introduite plus haut, a un sens physique bien clair. Le mouvement apparaît en effet comme stable, puisque l'itération du procédé qui fait passer de M en X ramène en M . On pourrait peut-être étudier des itérations particulières qui mèneraient à un point d'accumulation, ou redonneraient cycliquement le point de départ. Mais dans ce cas on imagine mal quel serait le processus d'itération de l'énergie. Nous signalons que l'un des cas envisagé dans ce paragraphe est justement le mouvement que décrit T. Takabayasi [4] pour le lagrangien à variables spinorielles :

$$\mathcal{L} = -iQ [\tilde{\zeta} \dot{\zeta} - \zeta \dot{\tilde{\zeta}}] + p_\mu [\dot{x}_\mu - i \tilde{\zeta} \gamma_\mu \zeta] \\ + \frac{\Lambda}{2} \{ (\tilde{\zeta} \zeta)^2 + i (\tilde{\zeta} \gamma_5 \zeta)^2 - 1 \}. \quad (1)$$

Si $s_\mu^2 = s_\mu^1$, $t_\mu^2 = -t_\mu^1$, comme nous en faisons maintenant l'hypothèse, alors on a

$$w_\alpha s_\alpha = w_\alpha t_\alpha = 0.$$

Ces deux conditions, portées dans III (3), donnent

$$\dot{t}_\alpha s_\alpha = 0 \quad (2)$$

$$\dot{t}_\alpha t_\alpha = 0. \quad (3)$$

On en déduit d'abord que la distance

$$XM = \sqrt{t_\alpha t_\alpha}$$

est une constante du mouvement. D'autre part, il est facile de montrer que, dans le cas général, on a

$$\dot{s}_\alpha t_\alpha = 0. \quad (4)$$

à cause de

$$\dot{s}_\mu = (s_\lambda \dot{v}_\lambda) v_\mu + im \varepsilon_{\mu\nu\lambda} t_\lambda v_\lambda \dot{v}_\nu. \quad (5)$$

On en conclut que $s_\alpha \dot{t}_\alpha$ est aussi une constante du mouvement. Nous avons introduit le vecteur A_μ au paragraphe précédent

$$(A_\mu v_\mu = A_\mu p_\mu = A_\mu w_\mu = 0).$$

Nous avons en outre $A_\mu t_\mu = -t_\alpha \dot{t}_\alpha$. Ici cette quantité est nulle, et on en déduit qu'il existe une relation linéaire entre p_α , t_α , v_α , w_α .

$$p_\mu = At_\mu + Bv_\mu + Cw_\mu. \quad (6)$$

En saturant d'abord par v_α et w_α , on calcule B et C d'où

$$p_\mu = At_\mu + \frac{m}{1 - (v_\alpha w_\alpha)^2} v_\mu + \frac{\mu}{1 - (v_\alpha w_\alpha)^2} w_\mu + \frac{v_\alpha w_\alpha}{1 - (v_\alpha w_\alpha)^2} (mw_\mu - \mu v_\mu). \quad (7)$$

Si maintenant on multiplie par s_α , on en tire la valeur de A , soit $\frac{p_\alpha s_\alpha}{t_\alpha s_\alpha}$. Mais on a aussi, en multipliant III (31) par s_α

$$p_\alpha s_\alpha = -\dot{m} t_\alpha s_\alpha \quad (8)$$

d'où la valeur de p_α

$$p_\mu = -\dot{m} t_\mu + \frac{m}{1 - (v_\alpha w_\alpha)^2} v_\mu + \frac{\mu}{1 - (v_\alpha w_\alpha)^2} w_\mu + \frac{v_\alpha w_\alpha}{1 - (v_\alpha w_\alpha)^2} (mw_\mu - \mu v_\mu). \quad (9)$$

Remarquons qu'en saturant (9) et III (31) par t_α , au lieu de s_α , on obtient

$$t_\alpha t_\alpha = -\dot{m} t_\alpha t_\alpha \text{ à partir de (9)} \quad (10)$$

$$p_\alpha t_\alpha = -\dot{m} t_\alpha t_\alpha + i\varepsilon_{\mu\nu\lambda} s_\lambda v_\lambda \dot{v}_\nu t_\mu \text{ à partir de III (31)} \quad (11)$$

Le second terme du second membre de (11) est $s_\alpha \dot{s}_\alpha$, à cause de (5), d'où

$$\dot{s}_\alpha s_\alpha = 0, \text{ équation qui fait pendant à } \dot{t}_\alpha t_\alpha = 0. \quad (12)$$

Reprenons l'identité III (33), où $\Omega = -1$, c'est

$$(t_\alpha v_\alpha) p_\lambda s_\lambda = (t_\alpha s_\alpha) p_\lambda \dot{v}_\lambda, \quad (13)$$

que nous comparons à

$$p_\lambda s_\lambda = (t_\alpha s_\alpha) p_\lambda \dot{v}_\lambda - \dot{m} t_\alpha s_\alpha. \quad (14)$$

Ici comme $\dot{t}_\alpha s_\alpha = 0$, d'après (2), il vient, suivant les cas

A) Si

$$p_\alpha \dot{v}_\alpha = -\dot{m} \neq 0 \text{ et } p_\alpha s_\alpha \neq 0$$

alors

$$t_\alpha \dot{v}_\alpha = -\dot{t}_\alpha v_\alpha = 1.$$

B) Si

$$p_\alpha s_\alpha = 0 \text{ et } t_\alpha \dot{v}_\alpha \neq 0$$

on devra avoir, soit $\dot{m} = 0$, soit $t_\alpha s_\alpha = 0$. Nous allons donner rapidement quelques indications sur chacun de ces types de mouvement.

A) Comme $v_\alpha \dot{t}_\alpha = -1$, si nous portons cette valeur dans III (3) il vient

$$(d\theta/d\tau) w_\alpha v_\alpha = 0. \quad (15)$$

Ou bien $d\theta/d\tau = 0$, et alors X est un point fixe de repère du laboratoire, et M tourne autour de ce point fixe à une distance constante; ou bien $v_\alpha w_\alpha = 0$ et les deux points tournent l'un autour de l'autre de telle sorte que M atteigne la vitesse de la lumière dans le repère propre de X , et réciproquement. On a alors

$$p_\mu = -\dot{m} t_\mu + m v_\mu + \mu w_\mu.$$

Dans le cas où $d\theta/d\tau = 0$, les équations du paragraphe précédent donnent lieu à des calculs simples, et on trouve

$$(t_\alpha s_\alpha) \varphi_\mu = m t_\mu \quad m = \varphi_\alpha s_\alpha \quad A_\mu = 0$$

$$\omega_{\mu\nu} t_\nu = v_\mu. \quad (16)$$

B) Ici deux cas se présentent encore, selon que $t_\alpha s_\alpha$ égale zéro ou diffère de zéro. Dans le premier cas, on en tire d'abord $p_\alpha s_\alpha = 0$. Ces valeurs, portées dans III (45), conduisent à $\mathcal{M}_{\rho\lambda} A_\lambda = 0$.

Mais plus intéressant est le cas où $t_\alpha s_\alpha = 0$, ce qui conduit tout naturellement à poser $\dot{m} = 0$. Nous allons montrer que t_α et s_α sont alors parallèles.

Remarquons tout d'abord que $\dot{m} = 0$ entraîne

$$p_\alpha s_\alpha = 0 \quad p_\alpha t_\alpha = 0 \quad (17)$$

$$p_\lambda \dot{s}_\lambda = 0 \quad p_\lambda \dot{t}_\lambda = 0.$$

Si nous nous plaçons alors dans le repère $p_1 = 0$, nous voyons que nous avons affaire à quatre vecteurs s_α , \dot{s}_α , t_α , \dot{t}_α , qui se trouvent entièrement dans un hyperplan à trois dimensions. Comme, d'après les équations du début du paragraphe, s_α et t_α sont tous deux perpendiculaires à \dot{s}_α et \dot{t}_α , on en conclut que s_α et t_α sont colinéaires. D'où

$$s_\mu = A t_\mu. \quad (18)$$

A est une constante du mouvement. En multipliant (18) par s_α , et en se souvenant que $s_\alpha s_\alpha$ et $t_\alpha t_\alpha$ sont des constantes du mouvement, on en déduit la même propriété pour A . On peut donc écrire

$$\dot{s}_\mu = A \dot{t}_\mu \quad (19)$$

Si nous utilisons maintenant les valeurs de \dot{s}_α et \dot{t}_α données plus haut par III (31) et IV (5), et que nous les portons dans (11), il vient la valeur de A , soit :

$$\begin{aligned} s_\mu &= m \dot{t}_\mu \\ s_\mu &= m t_\mu \end{aligned} \quad (20)$$

Comme $\dot{m} = 0$ la valeur de p_μ dans le cas envisagé est une combinaison de v_μ et ω_μ , c'est

$$\begin{aligned} p_\mu &= \frac{1}{1 - (v_\alpha \omega_\alpha)^2} (m v_\mu - \mu \omega_\mu) \\ &+ \frac{v_\alpha \omega_\alpha}{1 - (v_\alpha \omega_\alpha)^2} (m \omega_\mu - \mu v_\mu) \text{ d'après (9)} \end{aligned} \quad (21)$$

A_μ étant un vecteur perpendiculaire à p_α , v_α , ω_α , A_μ est ici nul, puisqu'il existe une combinaison linéaire entre ces trois vecteurs. On peut donc écrire

$$(d\theta/d\tau) \omega_\mu = v_\mu - \omega_{\mu\nu} t_\nu \quad (22)$$

Le cas ci-dessus étudié est justement le mouvement de Takabayasi [4], où les hypothèses de base étaient $\dot{m} = p_\alpha s_\alpha = 0$. Nous avons vu ici comment, grâce à la notion de réciprocité, ces hypothèses s'introduisent d'elles-mêmes.

* * *

Nous avons donc vu que la notion physique de mouvement bi-ponctuel fait apparaître commodément un certain nombre de mouvements simples. Il fallait évidemment que la donnée du premier rotateur relativiste permette de définir le second sans ambiguïté, et c'est pourquoi nous avons supposé que le tenseur $\mathcal{M}_{\mu\nu}$ à lui seul permettait cette définition, qu'il représentait donc à lui seul le mouvement interne d'une particule. Nous avons alors introduit l'autre extrémité du vecteur t_μ , qui joue un rôle analogue au premier rotateur relativiste (la particule donnée).

Comme nous avons vu que $\mathcal{M}_{\mu\nu}$ décrit la rotation locale, nous pouvons supposer un champ de $\mathcal{M}_{\mu\nu}$, c'est-à-dire un fluide de particules, et adjoindre à ce fluide l'ensemble des particules réciproques. On pourra alors, par exemple, écrire que le mouvement global du fluide est stable quand l'ensemble des lignes de courant réciproques se confond avec l'ensemble des lignes de courant directes. Ce serait une sorte de condition de Weyssenhoff appliquée à un fluide.

On peut enfin espérer, dans le cadre des théories de particules qu'on élabore à l'Institut Henri-Poincaré, que ces quelques mouvements classiques aideront à définir des critères de classification ou sont des descriptions classiques de mouvements internes de particules de la classification.

Manuscrit reçu le 19 novembre 1960.

BIBLIOGRAPHIE

- | | |
|---|---|
| <p>[1] BOHM (D.) et VIGIER (J. P.), <i>Phys. Rev.</i>, 1958, 109, 1882.</p> <p>[2] MÖLLER (C.), <i>Theory of Relativity</i>, Oxford, Clarendon Press, 1955, chap. I.</p> | <p>[3] KLEMAN (M.), <i>C. R. Acad. Sc.</i>, 1958, 247, 1718 et 1831</p> <p>[4] TAKABAYASI (T.), <i>Nuovo Cimento</i>, 1959, 13, 3.</p> <p>[5] KLEMAN (M.), <i>C. R. Acad. Sc.</i>, 1959, 248, 1617-1620.</p> |
|---|---|

ÉLARGISSEMENT ET DÉPLACEMENT DES RAIES DE RÉSONANCE MAGNÉTIQUE CAUSÉS PAR UNE EXCITATION OPTIQUE *

Par J. P. BARRAT,

Laboratoire d'Optique, Faculté des Sciences, Caen.

et C. COHEN-TANNOUDJI,

Laboratoire de Physique de l'E. N. S., 24, rue Lhomond, Paris (5^e).

Résumé. — L'effet global des processus d'absorption et d'émission de photons de résonance optique sur l'état fondamental d'un ensemble d'atomes est étudié à partir d'équations d'évolution établies précédemment. On met ces équations sous une forme plus simple grâce à une « approximation séculaire », toujours valable dans les cas pratiques. On tient compte également de l'effet éventuel d'un champ de radiofréquence. Certains résultats sont établis, tels que : la description du pompage optique comme un processus de relaxation dans l'état fondamental ; la possibilité d'une conservation partielle de la cohérence au cours du cycle de pompage ; la prévision de certains déplacements des raies de résonance magnétique sous l'influence de l'excitation optique ; l'expression des signaux de détection optique à partir des éléments de la matrice densité dans l'état fondamental.

Abstract. — The total effect of absorption and emission of resonance radiation on the ground state of an ensemble of atoms is derived from equations established in an earlier paper. These equations are put in a simpler form by means of a "secular approximation" which is satisfied in all practical cases. The effect of a radiofrequency field is taken into account. Some of the results obtained are : description of optical pumping as a relaxation process in the ground state ; possibility of a partial conservation of coherence during the pumping cycle ; prediction of some shifts of the magnetic resonance lines under the influence of the optical excitation ; expression for the optically detected signals as a function of the elements of the density matrix in the ground state.

IV. ÉVOLUTION GLOBALE DE L'ÉTAT FONDAMENTAL.

A. Équations d'évolution. — 1. ÉTABLISSEMENT DES ÉQUATIONS. — Pour obtenir l'évolution globale de la matrice densité ρ représentant l'ensemble des atomes dans l'état fondamental, nous ajoutons les effets de l'excitation optique, décrits par (II, 13), et ceux de la retombée, décrits par (III, 10), obtenant :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \rho_{\mu\mu'} = & - \left(\frac{1}{2T_p} + i\Delta E' \right) \sum_{\mu''} A_{\mu\mu''} \rho_{\mu''\mu'} e^{i(\mu - \mu'')\omega_I t} \\ & - \left(\frac{1}{2T_p} - i\Delta E' \right) \sum_{\mu''} A_{\mu''\mu'} \rho_{\mu\mu''} e^{i(\mu'' - \mu')\omega_I t} \\ & + \frac{\Gamma}{T_p} \sum_{\mu''\mu'''} \rho_{\mu''\mu'''} \\ & e^{i[(\mu - \mu') - (\mu'' - \mu''')]\omega_I t} \frac{B_{\mu''\mu'''}^{\mu\mu'}}{\Gamma + i[(\mu - \mu')\omega_e - (\mu'' - \mu''')\omega_I]} \end{aligned} \quad (IV-1)$$

Le système d'équations différentielles linéaires auquel obéissent les $\rho_{\mu\mu'}$ a pour coefficients soit des constantes d'ordre de grandeur $\frac{1}{T_p}$ ou $\Delta E'$, soit des

(*) Cette étude fait suite à un premier article paru dans le précédent numéro du *Journal de Physique* [1].

constantes de même ordre de grandeur multipliées par des exponentielles $e^{ir\omega_I t}$ (r entier).

2. RÉSOLUTION DES ÉQUATIONS (IV-1) PAR APPROXIMATIONS SUCCESSIVES. APPROXIMATION SÉCULAIRE. — Nous montrons en appendice I que le système obtenu (IV-2) en ne gardant que les coefficients constants du second membre des équations (IV-1),

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \rho_{\mu\mu'} = & - \left[\left(\frac{1}{2T_p} + i\Delta E' \right) A_{\mu\mu} \right. \\ & + \left. \left(\frac{1}{2T_p} - i\Delta E' \right) A_{\mu'\mu'} \right] \rho_{\mu\mu'} \\ & + \frac{\Gamma}{T_p} \sum_{\mu''\mu'''} \frac{B_{\mu''\mu'''}^{\mu\mu'}}{\Gamma + i(\mu - \mu')(\omega_e - \omega_I)} \rho_{\mu''\mu'''} \end{aligned} \quad (IV-2)$$

a pour solution une solution approchée de (IV-1), lorsque les condition (IV-3)

$$\begin{cases} \omega_I / \Delta E' \gg 1 \\ \omega_I T_p \gg 1 \end{cases} \quad (IV-3)$$

sont satisfaites. L'erreur commise sur la solution si l'on remplace (IV-1) par (IV-2) est de l'ordre de $1/\omega_I T_p$. Cette approximation, dite « approximation séculaire », sera faite dans tout ce qui suit. Physiquement, les termes exponentiels $e^{ir\omega_I t}$ oscillent trop rapidement (à la fréquence de Larmor

$\omega_I/2\pi$ de l'état fondamental) pour qu'ils puissent avoir un effet appréciable sur l'évolution de ρ qui n'est notable que pour des temps de l'ordre de $1/\Delta E'$, $T_p \gg 2\pi/\omega_I$.

3. JUSTIFICATION DES APPROXIMATIONS FAITES. — Nous venons de voir que $\rho_{\mu\mu'}$ varie avec une vitesse caractérisée par les temps T_p et $1/\Delta E'$.

Or nous avons supposé dans le calcul de l'expression (II-4) que $\rho_{\mu\mu'}$ variait très lentement sur des intervalles de temps de l'ordre de $1/\Delta$. Cette hypothèse est justifiée puisque d'après (I-1) et (IV-3)

$$1/\Delta \ll 1/\omega_I \ll T_p, \quad 1/\Delta E'.$$

D'autre part, dans le calcul de l'expression (III, 10) nous avons admis que $\rho_{\mu\mu'}$ variait lentement devant la durée de vie $\tau = 1/\Gamma$ de l'état excité. Nous devons donc compléter les conditions de validité (IV-3) par

$$\begin{cases} \Gamma/\Delta E' \gg 1 \\ \Gamma T_p \gg 1 \end{cases} \quad (\text{IV-4})$$

Les conditions (IV-3) et (IV-4) expriment physiquement que le déplacement $\Delta E'$ et la largeur $1/T_p$ d'origine optique des raies de résonance magnétique sont petits devant la fréquence $\omega_I/2\pi$ de ces raies (fréquence de Larmor de l'état fondamental), et devant la largeur naturelle du niveau excité. Elles portent en fait sur la fréquence $\omega_I/2\pi$ et sur le flux lumineux de pompage. Elles sont toujours remplies dans les expériences usuelles.

Il faut y ajouter la condition (I-1) $\Delta \gg \omega_e, \omega_I, \Gamma$. On pourrait s'affranchir de la restriction $\Delta \gg \omega_e, \omega_I$ en compliquant l'écriture des équations.

4. MATRICE DENSITÉ DANS L'ÉTAT EXCITÉ. — Les approximations (IV-3), qui impliquent aussi pratiquement $\omega_e T_p \gg 1$ permettent d'intégrer (II-18), en cherchant directement la solution forcée de l'équation avec second membre et en négligeant la variation de $\rho_{\mu\mu'}$ devant l'exponentielle

$$e^{i[(m-m')\omega_e - (\mu-\mu')\omega_I]t}$$

On trouve

$$\begin{aligned} \rho_{mm'}(t) &= \frac{1}{T_p} \sum_{\mu\mu'} \rho_{\mu\mu'}(t) e^{i[(m-m')\omega_e - (\mu-\mu')\omega_I]t} \\ &\quad \frac{\langle m|e_{\lambda_0} \cdot D|\mu \rangle \langle \mu'|e_{\lambda_0} \cdot D|m' \rangle}{\Gamma + i[(m-m')\omega_e - (\mu-\mu')\omega_I]}. \end{aligned} \quad (\text{IV-5})$$

Ce résultat, joint à (III-4), permet de calculer les intensités de la lumière de fluorescence réémises dans les différentes directions. Nous avons également vu (§ II) comment calculer la quantité de lumière absorbée. Notre formalisme permet donc de décrire l'évolution de l'état fondamental sous l'influence du pompage optique, et de calculer d'autre part les signaux de détection optique.

B. Interprétation physique. — 1. STRUCTURE DES ÉQUATIONS. — Les équations (IV-2) montrent

qu'un élément $\rho_{\mu\mu'}$ de la matrice densité est couplé à tous les autres éléments $\rho_{\mu''\mu'''}$ tels que

$$\mu - \mu' = \mu'' - \mu'''.$$

Elles se divisent donc en groupes distincts, $2I + 1$ équations couplées pour $\mu - \mu' = 0$, $2I$ pour $\mu - \mu' = 1$, et ainsi de suite. Elles sont, à cet égard, très analogues aux équations de relaxation de Bloch-Ayant-Kubo-Tomita [2] décrivant l'évolution d'un ensemble de spins soumis à une interaction aléatoire avec le réseau, qui varie assez vite pour que l'approximation de rétrécissement par le mouvement soit valable. L'approximation séculaire est également utilisée dans ce cas, la condition $\omega_I T_p \gg 1$ s'écrit alors $\omega_I T \gg 1$ où T est le temps de relaxation.

2. ÉVOLUTION DES POPULATIONS. — Les populations des niveaux μ sont les $\rho_{\mu\mu}$, qui satisfont à

$$\frac{d\rho_{\mu\mu}}{dt} = -\frac{A_{\mu\mu}}{T_p} \rho_{\mu\mu} + \frac{1}{T_p} \sum_{\mu'} B_{\mu\mu'}^{\mu\mu} \rho_{\mu'\mu'}. \quad (\text{IV-6})$$

On pose

$$\begin{aligned} P_{\mu' \rightarrow \mu} &= \frac{B_{\mu\mu'}^{\mu\mu}}{T_p} = \frac{1}{T_p} \sum_m |\langle m|e_{\lambda_0} \cdot D|\mu' \rangle|^2 \\ &\quad |C_{II}(F, m; m - \mu, \mu)|^2 \end{aligned} \quad (\text{IV-7})$$

$\frac{1}{T_p} |\langle \mu'|e_{\lambda_0} \cdot D|m \rangle|^2$ est la probabilité par unité de temps de passage du niveau μ' au niveau m par absorption d'un photon ;

$$|C_{II}(F, m; m - \mu, \mu)|^2$$

est la probabilité relative de passage d'un niveau m déterminé à l'un des niveaux μ par émission spontanée. $P_{\mu' \rightarrow \mu}$ représente donc la probabilité par unité de temps d'un passage du niveau μ' au niveau μ par résonance optique. D'ailleurs, on sait que $\sum_{\mu} |C_{II}(F, m; m - \mu, \mu)|^2 = 1$ et l'on peut écrire :

$$\begin{aligned} \frac{A_{\mu\mu}}{T_p} &= \frac{1}{T_p} \sum_m |\langle m|e_{\lambda_0} \cdot D|\mu \rangle|^2 \\ &= \frac{1}{T_p} \sum_{\mu'} |\langle m|e_{\lambda_0} \cdot D|\mu \rangle|^2 |C_{II}(F, m; m - \mu', \mu')|^2 \\ &= \sum_{\mu'} P_{\mu \rightarrow \mu'} \end{aligned} \quad (\text{IV-8})$$

(IV-6) s'écrit alors :

$$\frac{d\rho_{\mu\mu}}{dt} = -\left(\sum_{\mu'} P_{\mu \rightarrow \mu'}\right) \rho_{\mu\mu} + \sum_{\mu'} (P_{\mu' \rightarrow \mu}) \rho_{\mu'\mu'} \quad (\text{IV-9})$$

L'interprétation en est alors évidente : la variation de la population $\rho_{\mu\mu}$ du niveau μ est égale, par unité de temps, à tout ce qui arrive des autres niveaux μ' , diminué de tout ce qui part vers les autres niveaux μ' . Ceci est à rapprocher des équations

tions obtenues en théorie de la relaxation. La principale différence est que, dans notre cas,

$$P_{\mu \rightarrow \mu'} \neq P_{\mu' \rightarrow \mu},$$

au moins en général. Si bien que l'on peut obtenir des différences de populations appréciables entre les niveaux par suite de l'absorption et de la réémission de photons. C'est le principe même du pompage optique. La matrice des $(2I + 1)$ quantités $P_{\mu \rightarrow \mu'}$ n'est autre que la matrice de pompage optique déjà utilisée par divers auteurs [3].

Remarquons que bien entendu

$$\frac{d}{dt} \text{Trace } \rho = \frac{d}{dt} \sum_{\mu} \rho_{\mu\mu} = 0,$$

c'est-à-dire que la somme des populations de l'état fondamental est constante.

3. ÉVOLUTION DE LA COHÉRENCE. CAS PARTICULIER DE 2 NIVEAUX. — Dans ce cas, qui est par exemple celui de l'isotope ^{199}Hg , la matrice ρ ne comporte qu'un seul élément non diagonal, $\rho_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}$ (que nous ne distinguons pas de $\rho_{-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}$ qui en est complexe conjugué), puisqu'il n'y a que 2 sous-niveaux Zeeman ($I = \frac{1}{2}$, $\mu = \pm \frac{1}{2}$). L'équation (IV-2) s'écrit alors :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \rho_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} = & -\rho_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} \left[\frac{A_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}} + A_{-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}}{T_p} + i\Delta E' \left(A_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}} - A_{-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} \right) \right] \\ & + \frac{\Gamma}{T_p} \frac{L_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}}{\Gamma + i(\omega_e - \omega_f)} \rho_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (\text{IV-10})$$

D'où :

$$\rho_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}(t) = \rho_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}(t_0) e^{-\left(\frac{1}{T_p} + i\varepsilon\right)(t-t_0)} \quad (\text{IV-11})$$

avec

$$\frac{1}{T_2} = \frac{A_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}} + A_{-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}}{2T_p} - \frac{1}{T_p} B_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} \frac{\Gamma^2}{\Gamma^2 + (\omega_e - \omega_f)^2} \quad (\text{IV-12a})$$

$$\varepsilon = \Delta E' \left(A_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}} - A_{-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} \right) + \frac{B_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}}{T_p} \frac{\Gamma(\omega_e - \omega_f)}{\Gamma^2 + (\omega_e - \omega_f)^2} \quad (\text{IV-12b})$$

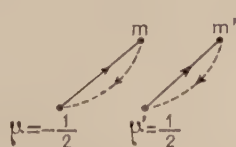


FIG. 1a,

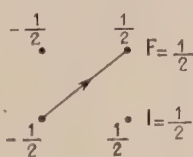


FIG. 1b,

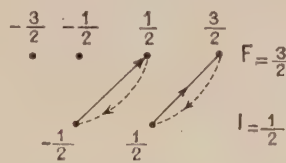


FIG. 1c,

a) *Interprétation de T_2* : T_2 est la constante de temps avec laquelle le module de $\rho_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}$ décroît. $1/T_2$ est la probabilité par unité de temps de disparition de la cohérence. $1/T_2$ comprend 2 termes. Le 1^{er},

$$\frac{1}{T_2} = \frac{A_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}} + A_{-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}}{2T_p}$$

est la demi-somme des inverses des durées de vie $1/T_{\frac{1}{2}} = A_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}/T_p$, $1/T_{-\frac{1}{2}} = A_{-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}/T_p$ des niveaux $\mu = +1/2$ et $\mu = -1/2$. Il représente la disparition de la cohérence sous l'effet de l'excitation optique qui arrache les atomes à la superposition cohérente dans laquelle ils se trouvent. On peut dire qu'il représente la contribution de la relaxation longitudinale à la relaxation transversale.

Le 2^e terme :

$$-\frac{1}{T_2} = -\frac{B_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}}{T_p} \frac{\Gamma^2}{\Gamma^2 + (\omega_e - \omega_f)^2}$$

représente la fraction de la cohérence qui s'est conservée au cours du pompage et qui se retrouve, après absorption et émission d'un photon, dans l'état fondamental. Nous montrons dans l'appendice II qu'il est toujours négatif, et inférieur en module au 1^{er} terme. D'après l'expression (III-11) de $B_{\mu\mu'}^{\mu\mu'}$, cet effet n'existe que s'il existe 2 transitions de même nature (π , σ_+ ou σ_-), donc parallèles dans le diagramme de Grotrian partant respectivement des niveaux $1/2$ et $-1/2$ (fig. 1a). Ainsi il n'existe pas pour la composante hyperfine de la raie 2537 \AA partant du niveau $F=1/2$ du ^{199}Hg en excitation σ_+ (fig. 1b), mais il existe pour la composante hyperfine partant du niveau $F=3/2$ (fig. 1c). La variation de cet effet avec le champ magnétique suit une loi analogue à celle de l'effet Hanle [4]. On doit pouvoir l'observer expérimentalement en constatant une diminution de la contribution de l'intensité lumineuse à la largeur des raies de résonance magnétique lorsqu'on diminue le champ magnétique.

b) *Interprétation de ε* : La matrice densité $\sigma(t)$ en représentation de Schrödinger est liée à $\rho(t)$, matrice densité en représentation d'interaction, par

$$\sigma(t) = e^{-i\mathcal{H}_0 t} \rho(t) e^{i\mathcal{H}_0 t}.$$

Donc

$$\rho_{\mu\mu'}(t) = \rho_{\mu\mu'}(t_0) e^{-i(E_{\mu} - E_{\mu'})t},$$

et dans le cas examiné :

$$\sigma_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}(t) = \sigma_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}(t_0) e^{-\left(\frac{1}{T_2} + i\omega_f + i\varepsilon\right)(t-t_0)} \quad (\text{IV-13})$$

ε représente donc un changement de la différence d'énergie entre les sous-niveaux Zeeman. D'après (IV-12b), ε comprend aussi 2 termes.

Le 1^{er} terme $\Delta E' \left(A_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}} - A_{-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} \right)$ représente le déplacement dû à la différence des selfs-énergies $\Delta E' A_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}$ et $\Delta E' A_{-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}$ des 2 sous-niveaux $\pm 1/2$ *. Nous avons déjà donné plus haut l'interprétation physique de $\Delta E'$ (§ II, 4).

Remarquons que notre calcul s'applique à une composante hyperfine particulière de la raie de résonance. Dans le cas de l'isotope ^{199}Hg , il s'agit par exemple de la transition \tilde{k}_{01} (ou \tilde{k}_{02}) reliant le niveau hyperfin unique $F = 1/2$ du niveau fondamental 6^1S_0 au niveau hyperfin $F = 1/2$ (ou $F = 3/2$) du niveau excité 6^3P_1 . Nous supposons le centre k_1 de la raie excitatrice suffisamment proche de \tilde{k}_{01} et \tilde{k}_{02} . Comme il s'agit d'une self-énergie, nous devons tenir compte également des transitions virtuelles vers l'autre niveau hyperfin $F = 3/2$ (ou $F = 1/2$) du niveau de résonance et vers les autres niveaux excités. Considérons l'effet des transitions virtuelles vers les niveaux hyperfins k'_{0F} d'un autre niveau excité. $k_1 - k'_{0F}$ varie alors infiniment peu d'une composante hyperfine à l'autre. D'après (II, 8, b) il en est donc de même pour $\Delta E'$. Il est facile alors de voir que par suite des règles de somme sur les $A_{\mu\mu'}$, l'effet de ces transitions virtuelles est de déplacer les 2 sous-niveaux $\pm 1/2$ de la même quantité.

Le déplacement de la raie de résonance magnétique est donc sensible uniquement aux transitions virtuelles vers l'ensemble des niveaux hyperfins du niveau excité proche de k_1 .

Le 2^e terme représente un déplacement d'énergie fondamentalement différent du précédent. Il est lié aux transitions *réelles* vers le niveau de résonance. Il n'existe que si une fraction de cohérence se conserve au cours du pompage. Lors du temps $\tau = 1/\Gamma$ passé en moyenne dans l'état excité, cette fraction de cohérence « voit » un effet Zeeman ω_e et non plus ω_f . D'où un déphasage de l'ordre de $(\omega_e - \omega_f)/\Gamma$ qu'il faut multiplier par

$$B_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} = \frac{\Gamma^2}{\Gamma^2 + (\omega_e - \omega_f)^2},$$

(*) Cet effet a été récemment mis en évidence par l'un de nous dans le cas du pompage optique du ^{199}Hg [5].

fraction de la cohérence qui se conserve. Si le champ magnétique est grand, l'effet est petit parce qu'une faible fraction de la cohérence se conserve. S'il est petit, l'effet l'est aussi parce que les effets Zeeman et les déphasages le sont. Il y a optimum lorsque $\omega_e - \omega_f \sim \Gamma$. Sur le ^{199}Hg , on peut imaginer des expériences où le déplacement, dû à cet effet, de la raie de résonance magnétique serait de l'ordre de $1/2$ de la largeur due à l'excitation optique, donc facilement observable.

4. ÉVOLUTION DE LA COHÉRENCE DANS LE CAS GÉNÉRAL. — Dans ce cas, on a :

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_{\mu\mu'}}{dt} = & -\left(\frac{1}{T_{2\mu\mu'}} + i\varepsilon_{\mu\mu'}\right) \rho_{\mu\mu'} \\ & + \sum_{\substack{\mu'', \mu''' \\ \mu'' - \mu''' = \mu - \mu'}} \frac{B_{\mu''\mu'''}^{\mu\mu'}}{T_p} \frac{\Gamma}{\Gamma + i(\mu - \mu')(\omega_e - \omega_f)} \rho_{\mu''\mu'''} \end{aligned} \quad (\text{IV-14})$$

$1/T_{2\mu\mu'}$ et $\varepsilon_{\mu\mu'}$ ont des définitions analogues à (IV-12). Leur interprétation a déjà été donnée. Les termes nouveaux représentent un transfert partiel vers le couple (μ, μ') de la cohérence existant dans le couple (μ'', μ''') , par l'intermédiaire de l'état excité. Le système auquel satisfont les $\rho_{\mu\mu'}$, pour $\mu - \mu'$ fixé, est très analogue au système obtenu en théorie de la relaxation. La matrice associée à ce système [matrice d'élargissement [6]] a ses valeurs propres à partie réelle négative (cf. appendice II). Le pompage fait donc disparaître la cohérence comme un processus de relaxation.

V. ÉVOLUTION GLOBALE EN PRÉSENCE D'UN CHAMP DE RADIOFRÉQUENCE.

1. **Position du problème.** — Nous avons jusqu'à présent étudié la variation dans le temps, sous l'influence d'une excitation optique, d'un ensemble d'atomes dans l'état fondamental, représentés par une matrice densité $\rho(t)$, connaissant la matrice $\rho(t_0)$ non diagonale *a priori* (c'est-à-dire qu'il peut y avoir cohérence à l'instant t_0). Nous allons maintenant étudier l'évolution de l'état fondamental sous l'action simultanée de l'excitation optique et d'un champ de radiofréquence H_1 , perpendiculaire au champ statique créant l'effet Zeeman, tournant à la fréquence ω voisine de ω_f . Nous négligerons l'action de ce champ sur l'état excité, soit que ω_e soit très différent de ω_f , soit que la durée de vie $\tau = \Gamma^{-1}$ de l'état excité soit trop courte pour qu'il puisse subir une action sensible de la part de H_1 . L'Hamiltonien représentant l'action de H_1 est :

$$\mathcal{H}_{RF} = \frac{\gamma H_1}{2} [I_+ e^{-i\omega t} + I_- e^{i\omega t}] \quad (\text{V-1})$$

où γ est le rapport gyromagnétique de l'état fondamental, I son moment cinétique.

Indiquons dès maintenant que les équations finales que nous obtenons dans ce cas sont analogues aux équations (IV-2), les seules différences étant :

a) $\rho(t)$, matrice densité en représentation d'interaction, est remplacée par $\tilde{\rho}(t)$, matrice densité dans le référentiel R tournant à la vitesse angulaire ω autour du champ statique :

$$\tilde{\rho}(t) = e^{i(\omega - \omega_I)I_z t} \rho(t) e^{-i(\omega - \omega_I)I_z t} \quad (V-2)$$

b) il apparaît, au second membre un terme

$$-i[\mathcal{H}, \tilde{\rho}]_{\mu, \mu'}$$

où

$$\mathcal{H} = (\omega_I - \omega) I_z + \gamma H_1 I_x \quad (V-3)$$

représente l'effet du champ statique et du champ H_1 dans le référentiel R .

c) ω_I doit, dans les équations, être remplacé par ω .

Pour établir ces résultats, nous étudierons successivement le processus d'absorption (cf. § II) et celui de réémission (cf. § III).

2. Équations du problème. — Au lieu de passer en représentation d'interaction pour l'état fondamental et l'état excité, nous effectuerons la transformation qui consiste à passer dans le référentiel tournant R pour l'état fondamental, et en représentation d'interaction pour ce qui concerne l'état excité et le rayonnement. On pose :

$$\begin{cases} \tilde{a}_\mu = e^{i\mu\omega t} a_\mu \\ b_{m; -k_i} = e^{i(k_0 - k_i + m\omega_e)t} a_{m; -k_i} \\ \tilde{a}_{\mu; -k_i; k, \lambda} = e^{i(\mu\omega + k - k_0)t} a_{\mu; -k_i; k, \lambda} \end{cases} \quad (V-4)$$

Cette transformation remplace \mathcal{H}_{RF} par \mathcal{H} et les équations de départ (I-9) deviennent, avec cet Hamiltonien supplémentaire :

$$i\dot{\tilde{a}}_\mu = \sum_{\mu'} \mathcal{H}_{\mu\mu'} \tilde{a}_{\mu'} + \sum_{m, i} \langle \mu, k_i, \lambda_0 | \tilde{\mathcal{H}}_I | m \rangle b_{m; -k_i} \quad (V-5a)$$

$$i\dot{b}_{m; -k_i} = \sum_{\mu'} \langle m | \tilde{\mathcal{H}}_I | \mu', k_i, \lambda_0 \rangle \tilde{a}_{\mu'} + \sum_{\mu'' k \lambda} \langle m | \tilde{\mathcal{H}}_I | \mu'', k, \lambda \rangle \tilde{a}_{\mu''; -k_i; k, \lambda} \quad (V-5b)$$

$$i\dot{\tilde{a}}_{\mu''; -k_i; k, \lambda} = \sum_{\mu'} \mathcal{H}_{\mu''\mu'} \tilde{a}_{\mu'; -k_i; k, \lambda} + \sum_{m'} \langle \mu'', k, \lambda | \tilde{\mathcal{H}}_I | m' \rangle b_{m'; -k_i} \quad (V-5c)$$

Les éléments de matrice de $\tilde{\mathcal{H}}_I$ sont obtenus en remplaçant ω_I par ω dans les expressions (I-10) de ceux de \mathcal{H}'_I . On a posé $\mathcal{H}_{\mu\mu'} = \langle \mu | \mathcal{H} | \mu' \rangle$.

3. Processus d'absorption. — Comme au § II, on intègre (V-5c) et on reporte dans (V-5b) obtenant

$$i\dot{b}_{m; -k_i} = \sum_{\mu'} \langle m | \tilde{\mathcal{H}}_I | \mu', k_i, \lambda_0 \rangle \tilde{a}_{\mu'} - i \sum_{\mu'' k \lambda} \int_{t_0}^t dt' \langle m | \tilde{\mathcal{H}}_I(t) | \mu'', k, \lambda \rangle \langle \mu'' | e^{-i\mathcal{H}(t-t')} | \mu \rangle \langle \mu, k, \lambda | \tilde{\mathcal{H}}_I(t') | m' \rangle b_{m'; -k_i}(t'). \quad (V-6)$$

Le calcul s'effectue alors de la manière classique indiquée au § II. Si l'on explicite les éléments de matrice de $\tilde{\mathcal{H}}_I$, on voit apparaître une exponentielle $e^{i[k_0 - k + m'\omega_e - \mu\omega - \mathcal{H}](t-t')}$; comme k_0 est très supérieur aux éléments de matrice de \mathcal{H} , à $m'\omega_e$ et à $\mu\omega$, on peut remplacer cette exponentielle par $e^{i(k_0 - k)(t-t')}$ ce qui revient à remplacer $\langle \mu'' | e^{-i\mathcal{H}(t-t')} | \mu \rangle$ par $\langle \mu'' | \mu \rangle = \delta_{\mu''\mu}$. Il reste alors

$$-i \left(\frac{\Gamma}{2} + i\Delta E \right) b_{m; -k_i}(t).$$

Ce résultat était prévisible : la radiofréquence agissant sur l'état fondamental ne modifie ni la durée de vie, ni la self-énergie de l'état excité. On a donc :

$$i\dot{b}_{m; -k_i} = -i \left(\frac{\Gamma}{2} + i\Delta E \right) b_{m; -k_i} + \sum_{\mu'} \langle m | \tilde{\mathcal{H}}_I | \mu', k_i, \lambda_0 \rangle \tilde{a}_{\mu'} \quad (V-7)$$

L'élimination de $b_{m; -k_i}$; entre (V-7) et (V-5a) se fait alors de manière identique à ce qui a été fait au § II, puisque \mathcal{H} n'intervient pas. Elle conduit à

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \tilde{\rho}_{\mu\mu'} &= -i[\mathcal{H}, \tilde{\rho}]_{\mu\mu'} \\ &- \left(\frac{1}{2T_p} + i\Delta E' \right) \sum_{\mu''} A_{\mu\mu''} \tilde{\rho}_{\mu''\mu'} e^{i(\mu - \mu'')\omega t} \\ &- \left(\frac{1}{2T_p} - i\Delta E' \right) \sum_{\mu''} A_{\mu''\mu} \tilde{\rho}_{\mu\mu''} e^{i(\mu'' - \mu')\omega t} \end{aligned} \quad (V-8)$$

On trouvera de même

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \rho_{mm'} &= -\Gamma \rho_{mm'} + \frac{1}{T_p} \sum_{\mu\mu'} e^{i[(m-m')\omega_e - (\mu - \mu')\omega]t} \\ &\langle m | e_{\lambda_0} D | \mu \rangle \langle \mu' | e_{\lambda_0} D | m' \rangle \rho_{\mu\mu'}. \end{aligned} \quad (V-9)$$

4. Processus de réémission. — On généralise facilement le calcul du § (III, 1). On intègre (V-5c), on prend le complexe conjugué de l'expression obtenue et on le multiplie membre à membre par (V-5c). On retrouve les mêmes simplifications que dans le calcul fait ci-dessus au § III, en raison du fait que l'émission spontanée ne dépend pas de la radio-

fréquence dans l'état fondamental. On obtient ainsi :

$$\frac{d^{(2)} \tilde{\rho}_{\mu\mu'}}{dt} = -i[\mathcal{H}, \tilde{\rho}]_{\mu,\mu'} + \Gamma \sum_{m,m'} e^{i(\mu'-\mu)(\omega_e-\omega)t} C_{1I}(F, m; m-\mu, \mu) C_{1I}(F, m', m'-\mu', \mu') \rho_{mm'}(t). \quad (V-10)$$

L'élimination de $\rho_{mm'}$ entre (V-9) et (V-10) donne alors

$$\frac{d^{(2)} \tilde{\rho}_{\mu\mu'}}{dt} = -i[\mathcal{H}, \tilde{\rho}]_{\mu,\mu'} + \frac{\Gamma}{T_p} \sum_{\mu''} \frac{\tilde{\rho}_{\mu''\mu'''} e^{i[(\mu-\mu')-(\mu''-\mu''')]\omega t} B_{\mu''\mu'''}^{\mu\mu'}}{\Gamma + i[(\mu-\mu')\omega_e - (\mu''-\mu''')\omega]}. \quad (V-11)$$

5. Équations d'évolution complètes. — En ajoutant (V-8) et (V-11) (en ne gardant bien entendu qu'une fois le terme contenant \mathcal{H}), on obtient l'équation d'évolution globale de $\tilde{\rho}$. On arrive aux équations (V-12)

$$\frac{d \tilde{\rho}_{\mu\mu'}}{dt} = -i[\mathcal{H}, \tilde{\rho}]_{\mu,\mu'} - \left[\frac{1}{2T_p} (A_{\mu\mu} + A_{\mu'\mu'}) + i\Delta E' (A_{\mu\mu} - A_{\mu'\mu'}) \right] \tilde{\rho}_{\mu\mu'} + \frac{1}{T_p} \sum_{\mu''-\mu'''=\mu-\mu'} \frac{\Gamma}{\Gamma + i[(\mu-\mu')(\omega_e-\omega)]} E_{\mu''\mu'''}^{\mu\mu'} \tilde{\rho}_{\mu''\mu'''}$$

en utilisant toujours l'approximation séculaire qui impose la condition de validité supplémentaire (V-13) : $\gamma H_1 \ll \omega$. (Les éléments de matrice de \mathcal{H} étant de l'ordre de γH_1 .)

Cette condition exprime que la largeur due à la radiofréquence des raies de résonance magnétique est petite devant la fréquence de ces raies.

Le système (V-12) montre bien que le pompage optique peut être globalement considéré comme un processus de relaxation. Il montre que les termes discutés en (IV-3b) interviennent bien pour déplacer les raies de résonance magnétique. Il devrait être complété par l'introduction (plus ou moins phénoménologique) de termes décrivant la relaxation proprement dite (désorientation des atomes par collision contre les parois, les molécules d'un gaz étranger, etc...). La résolution du système (V-12) permet de calculer les signaux de détection optique.

6. Signaux de détection optique. — a) *Lumière absorbée par unité de temps* ; elle s'obtient aisément en prenant la trace de (V-8)

$$L_A = \sum_{\mu} -\frac{d^{(1)} \tilde{\rho}_{\mu\mu}}{dt} = + \left(\frac{1}{2T_p} + i\Delta E' \right) \sum_{\mu''\mu'''} A_{\mu\mu''} \tilde{\rho}_{\mu''\mu'''} e^{i(\mu-\mu'')\omega t} + \text{complexe conjugué}, \quad (V-14)$$

On voit qu'une modulation peut apparaître aux fréquences $r\omega/2\pi$ (r entier) (expériences de faisceau croisé [7]).

b) *Lumière de fluorescence émise par unité de temps*, dans une direction et avec un état de polarisation donné. On l'obtient en calculant

$$L_F = \frac{d}{dt} \sum_{\mu i | k} [\tilde{a}_{\mu i - k; k, \lambda} \tilde{a}_{\mu i - k; k, \lambda}^*] = \frac{3}{8\pi} \Gamma \sum_{\mu m m'} e^{i(m'-m)\omega_e t} \langle \mu | e_{\lambda} \cdot D | m \rangle \rho_{mm'} \langle m' | e_{\lambda} \cdot D | \mu \rangle \quad (V-15)$$

avec $\rho_{mm'}$ donné par la généralisation de (IV-5)

$$\rho_{mm'} = \frac{1}{T_p} \sum_{\mu} \tilde{\rho}_{\mu\mu'}(t) e^{i[(m-m')\omega_e - (\mu-\mu')\omega]t} \frac{\langle m | e_{\lambda 0} \cdot D | \mu \rangle \langle \mu' | e_{\lambda 0} \cdot D | m' \rangle}{\Gamma + i[(m-m')\omega_e - (\mu-\mu')\omega]}. \quad (V-16)$$

CONCLUSION

En résumé, nous pouvons classer les résultats de cette étude en 3 parties :

1. Vue de l'état fondamental, et en présence ou non de radiofréquence, l'excitation optique par la raie de résonance peut être décrite mathématiquement et physiquement comme un processus de relaxation qui modifie la répartition des populations et détruit la cohérence. Cette destruction n'est cependant pas totale au cours d'un cycle de pompage : Une fraction de la cohérence peut se conserver au cours du cycle et ceci d'autant mieux que l'écart Zeeman des raies optiques est petit devant la largeur naturelle du niveau excité.

2. Les signaux de détection optique : absorption ou fluorescence, s'expriment entièrement en fonction des éléments de la matrice densité dans l'état fondamental. Les expressions exactes de ces signaux sont établies.

3. Des déplacements de fréquence des raies de résonance magnétique peuvent être provoqués par l'excitation optique. Le mécanisme de ces déplacements relève de 2 processus physiques entièrement différents : La self-énergie des sous-niveaux Zeeman en présence du rayonnement excitateur qui peut différer d'un sous-niveau à l'autre ; la conservation de la cohérence au cours du cycle de pompage qui permet de ramener dans l'effet Zeeman de l'état fondamental une partie de l'effet Zeeman de l'état excité.

APPENDICE I

JUSTIFICATION DE L'APPROXIMATION SÉCULAIRE (cf. § IV-2)

1. — Pour simplifier, considérons d'abord l'équation

$$dx/dt = (a + b e^{i\omega_f t}) x. \quad (1)$$

Sa solution rigoureuse est :

$$x = x_0 e^{at + \frac{b}{i\omega_f} e^{i\omega_f t}} \quad (2)$$

où x_0 est une constante.

On peut écrire :

$$x = x_0 e^{at} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{b}{i\omega_f} \right)^n \times \frac{1}{n!} e^{in\omega_f t} \quad (3)$$

Si $|b/\omega_f| \ll 1$, on peut limiter le développement à :

$$x = x_0 e^{at} \quad (4)$$

qui est la solution de

$$dx/dt = ax, \quad (5)$$

obtenue en négligeant le terme oscillant dans (1).

Ce résultat peut être retrouvé autrement. On résout

$$dx/dt = (a + \lambda b e^{i\omega_f t}) x \quad (6)$$

par un développement en puissances de λ et on fait ensuite $\lambda = 1$. A l'ordre 0 :

$$dx^{(0)}/dt = ax^{(0)},$$

d'où

$$x^{(0)} = x_0 e^{at}.$$

A l'ordre 1 :

$$dx^{(1)}/dt = ax^{(1)} + b e^{i\omega_f t} x^{(0)},$$

d'où

$$x^{(1)} = x_0 \frac{b}{i\omega_f} e^{i\omega_f t} e^{at}$$

etc... On retrouve ainsi tous les termes du développement (3), dont on ne garde que le 1^{er} (ordre 0) si $b/\omega_f \ll 1$.

Physiquement, le 2^e terme du second membre de (1) oscille trop rapidement par rapport à son amplitude pour avoir des effets notables.

2. — Le système (IV-1) s'écrit sous une forme générale

$$\frac{dX_n}{dt} = \sum_m (A_{nm} + B_{nm} e^{i\omega_f t} + C_{nm} e^{2i\omega_f t} + \dots) X_m \quad (7)$$

les coefficients A , B , C , ont pour ordre de grandeur $1/T_p$. On résoudra de même par un développement en puissances de λ le système

$$dX_n/dt = \sum_m A_{nm} X_m + \lambda \sum_m (B_{nm} e^{i\omega_f t} + C_{nm} e^{2i\omega_f t} + \dots) X_m \quad (8)$$

Le système

$$dX_n^{(0)}/dt = \sum_m A_{nm} X_m^{(0)} \quad (9)$$

obtenu à l'ordre 0 n'est autre que celui de l'« approxi-

mation séculaire ». Sa solution générale est de la forme :

$$X_n^{(0)} = \sum_r K_r \alpha_{nr} e^{\beta_r t} \quad (10)$$

où les α_{nr} et les β_r sont des constantes dépendant des A_{nm} , les K_r des constantes déterminées par les conditions initiales. Les β_r ont pour ordre de grandeur $1/T_p$. On peut toujours supposer les α_{nr} d'ordre de grandeur unité par une normalisation convenable. A l'ordre (1) on obtient :

$$\frac{dX_n^{(1)}}{dt} = \sum_m A_{nm} X_m^{(1)} + \sum_m (B_{nm} e^{i\omega_f t} + C_{nm} e^{2i\omega_f t} + \dots) X_m^{(0)} \quad (11)$$

On en déduit pour les $X_n^{(1)}$ des solutions de la forme :

$$X_n^{(1)} = \sum_{r,s,k} \alpha_{nr} e^{\beta_r t} \int_0^t M_{rs}^k e^{i(\beta_s - \beta_r + k\omega_f)t'} dt' \quad (12)$$

où les M_{rs}^k ont pour ordre de grandeur K/T_p (K : ordre de grandeur de K_r), k étant un nombre entier. On voit que le rapport des ordres de grandeur de $X_n^{(1)}$ et $X_n^{(0)}$ est $\frac{1}{T_p |\beta_r - \beta_s + ik\omega_f|}$.

Il en sera de même pour les rapports des termes d'ordre supérieur, $X_n^{(2)}$ à $X_n^{(1)}$... $X_n^{(a+1)}$ à $X_n^{(a)}$. Si $\omega_f T_p \gg 1$, on pourra se limiter aux ordres les plus bas, et en pratique on fera une erreur d'ordre de grandeur $1/\omega_f T_p$ en ne gardant que les termes d'ordre 0 (approximation séculaire).

APPENDICE II

Nous voulons démontrer que les valeurs propres de la matrice de relaxation $A_{\mu\mu'}$ définie dans le précédent appendice et associée au système séculaire (IV-2), ont leur partie réelle négative ou nulle.

D'après la remarque faite dans (IV, B, 1) cette matrice se subdivise en plusieurs sous-matrices correspondant aux différentes valeurs de $\mu - \mu'$. En particulier pour $\mu - \mu' = 0$, nous obtenons la matrice de pompage optique :

$$d\rho_{\mu\mu}/dt = - \left(\sum_{\mu'} P_{\mu \rightarrow \mu'} \right) \rho_{\mu\mu} + \sum_{\mu'} P_{\mu' \rightarrow \mu} \rho_{\mu'\mu'} \quad (1)$$

Montrons tout d'abord que les valeurs propres de la matrice de pompage optique ont leur partie réelle négative ou nulle.

Nous devons démontrer qu'aucune des quantités $\rho_{\mu\mu}(t)$ ne tend en module vers l'infini quand t tend vers l'infini.

A l'instant initial $t = t_0$ toutes les quantités $\rho_{\mu\mu}(t_0)$ sont positives ou nulles (populations). D'autre part, à partir de (1), on établit facilement que

$$\sum_{\mu} \frac{d}{dt} \rho_{\mu\mu} = \sum_{\mu\mu'} (-P_{\mu \rightarrow \mu'} + P_{\mu' \rightarrow \mu}) \rho_{\mu\mu} = 0.$$

Si nous démontrons que les $\rho_{\mu\mu}(t)$ restent toujours positifs ou nuls au cours du temps, comme leur somme est constante, nous aurons démontré qu'ils ne peuvent tendre vers l'infini.

Désignons par t_1 le premier instant après t_0 où l'une des quantités $\rho_{\mu\mu}$ (supposées toutes initialement positives) s'annule : $\rho_{\mu\mu}(t_1) = 0$. Il s'ensuit d'après (1) que

$$\left[\frac{d}{dt} \rho_{\mu\mu} \right]_{t=t_1} = \sum_{\mu' \neq \mu} (P_{\mu' \rightarrow \mu}) \rho_{\mu'\mu'}(t_1).$$

Comme les $\rho_{\mu'\mu'}(t_1)$ sont positifs par hypothèse ainsi que les $P_{\mu' \rightarrow \mu}$ d'après (IV-7) on en déduit que

$$\left[\frac{d}{dt} \rho_{\mu\mu} \right]_{t=t_1} > 0.$$

$\rho_{\mu\mu}$ ne pourra donc jamais devenir strictement négatif. Cette démonstration se généralise facilement au cas où plusieurs $\rho_{\mu\mu}$ s'annulent en même temps pour la première fois.

Pour une valeur bien déterminée et non nulle de $\mu - \mu'$, la matrice $A_{m\mu}$ est la matrice d'élargissement.

D'après la définition même des éléments d'une matrice densité, la solution rigoureuse des équations d'évolution (I, 9) satisfait à

$$|\rho_{\mu\mu'}(t)| \leq \sqrt{|\rho_{\mu\mu}(t)| \rho_{\mu'\mu'}(t)}. \quad (2)$$

Mais nous avons démontré que moyennant les conditions (IV-3) et (IV-4) la solution rigoureuse de (I-9) était très voisine de celle des équations séculaires (IV-2), l'erreur relative étant de l'ordre

de $1/\omega_e T_p$. L'inégalité (2) est donc valable également pour la solution de (IV-2). Comme nous venons de démontrer que les $\rho_{\mu\mu}(t)$ ne tendent pas vers l'infini, il s'ensuit qu'il en est de même pour les $|\rho_{\mu\mu'}|$ et que les valeurs propres des matrices d'élargissement ont leur partie réelle négative ou nulle.

Démontrons enfin que dans le cas de 2 niveaux (§ IV, B, 3), la quantité $1/T_2^*$ est positive. Physiquement ceci signifie que dans le cas de 2 niveaux, il y a une « restitution » partielle de la cohérence au cours de la retombée et non une destruction supplémentaire

$$\frac{1}{T_2^*} = \frac{B^{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}}}{T_p} \frac{1-\frac{1}{2}}{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} \frac{\Gamma^2}{\Gamma^2 + (\omega_e - \omega_t)^2}.$$

Il suffit de démontrer que $B_{\mu\mu'}^{\mu\mu'}$ est positif.

$$B_{\mu\mu'}^{\mu\mu'} = \sum_{\substack{m, m' \\ m-m'=\mu-\mu'}} \langle \mu | e_{\lambda_0} D | \mu \rangle \langle \mu' | e_{\lambda_0} D | \mu' \rangle$$

$$C_{1I}(F, m; m - \mu, \mu) C_{1I}(F, m'; m' - \mu', \mu').$$

Mais d'après l'expression (III-5) des $\langle \mu | e_{\lambda} D | m \rangle$, il vient en utilisant le fait que dans la sommation sur m et m' , $m - \mu = m' - \mu'$

$$I_{\mu\mu'}^{\mu\mu'} = \sum_{\substack{m, m' \\ m-m'=\mu-\mu'}} [C_{1I}(F, m; m - \mu, \mu)]^2 [C_{1I}(F, m'; m' - \mu', \mu')]^2 | \langle \mu = 0 | e_{\lambda} D | m_J = m - \mu \rangle_{I=0} |^2 > 0.$$

Manuscrit reçu le 20 février 1961.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] BARRAT (J. P.) et COHEN-TANNOUDJI (C.), *J. Physique Rad.*, 1961, **22**, 329.
- [2] ABRAGAM (A.), *Principes of nuclear magnetism*, Oxford Press, ch. 8.
- [3] MARGERIE (J.), *Diplôme d'Études Supérieures*, Paris, 1955. COHEN-TANNOUDJI (C.), *Diplôme d'Études Supérieures*, Paris, 1956. CAGNAC (B.), *Thèse*, Paris, 1960.
- [4] MITCHELL et ZEMANSKY, *Resonance radiation and excited atoms*, ch. 5.
- [5] COHEN-TANNOUDJI (C.), *C. R. Acad. Sc.*, 1961, **252**, 394.
- [6] AYANT (Y.), *J. Physique Rad.*, 1955, **16**, 411.
- [7] BELL (W. E.) et BLOOM (A. L.), *Phys. Rev.*, 1957, **107**, 1559.

LA DILATATION THERMIQUE DU MILIEU CRISTALLIN

Par J. LAVAL,
Collège de France, Paris,

I

Les facteurs de la dilatation

Résumé. — Les atomes, en oscillant, exercent les uns sur les autres des forces répulsives qui ont pour résultantes les tensions thermiques. Quand la température s'élève, les tensions thermiques s'amplifient et dilatent le milieu cristallin.

Cette première étude a pour objet les tensions thermiques qui ont lieu dans les cristaux cubiques formés par les métaux. On suppose que chaque oscillation fondamentale de l'agitation thermique conserve la même énergie moyenne qu'un oscillateur harmonique, et l'on évalue les tensions thermiques en fonction de la température dans le milieu cristallin libre de toute contrainte.

Abstract. — By oscillating the atoms exert upon one another repulsive forces which have thermal strains as resultants. When the temperature rises, the thermal strains increase and dilate the crystalline medium.

The subject of this first study is the thermal strains that take place in the cubic crystals of metals. It is supposed that each fundamental oscillation of the thermal agitation keeps the same average energy as that of an harmonic oscillator ; and thermal strains are estimated with reference to temperature in a crystalline medium free from any constraint.

A. Introduction. — Je me référerai dans cette étude aux deux mémoires intitulés « L'agitation thermique des atomes dans le milieu cristallin » [1] et « Les tensions thermiques dans le milieu cristallin » [2], et je représenterai les grandeurs par les symboles dont j'ai fait usage dans les mêmes mémoires.

Selon la théorie classique de l'état cristallin (Debye, Max Born), les forces de rappel développées par l'agitation thermique des atomes obéiraient à la loi de Hooke, et l'agitation thermique qui a lieu dans un cristal serait analysable en oscillations harmoniques indépendantes les unes des autres.

Cette conception est en désaccord avec les faits. Les oscillations thermiques du milieu cristallin ne développent pas des forces de rappel proportionnelles aux elongations, même aux températures proches du zéro absolu. Néanmoins, l'agitation thermique d'un cristal peut être résolue en composantes harmoniques. Mais ces composantes ne sont pas indépendantes. Elles comprennent des oscillations fondamentales, qui se confondraient avec les oscillations harmoniques considérées par la théorie classique si les forces de rappel devenaient conformes à la loi de Hooke, et des oscillations secondaires produites par les interférences entre les oscillations fondamentales [1]. D'autre part, les atomes, en oscillant, se repoussent mutuellement. Les tensions thermiques sont les résultantes de ces forces répulsives. Elles sont fonctions des périodes

du milieu cristallin, des dérivées troisièmes, quatrièmes, cinquièmes... de son énergie potentielle par rapport aux translations qui transportent les atomes les uns sur les autres, enfin des propriétés des oscillations thermiques : leur vecteur d'onde, leur fréquence, leur amplitude, la direction de leur elongation [2]. Si la structure atomique du milieu cristallin est simple et sa symétrie élevée, il est possible de déterminer, par la mécanique quantique, l'énergie potentielle d'un cristal à la température du zéro absolu, c'est-à-dire : lorsque l'agitation thermique est réduite au minimum [3], [4]. L'énergie potentielle varie avec la dilatation du milieu cristallin, donc avec la température de ce milieu libre de toute contrainte. Mais, si l'on connaît l'énergie potentielle au zéro absolu, et la dilatation entre le zéro absolu et la température Θ , on peut calculer l'énergie potentielle et les coefficients d'élasticité $N^{\alpha\gamma,\beta\delta}$ [5] du cristal porté à la température Θ ⁽¹⁾. Une élévation $\Delta\Theta$ de la température accroît les tensions thermiques, et par conséquent la dilatation. Les augmentations des tensions $\Delta T^{\alpha\gamma}$, et celles

(1) Je donne, dans le mémoire « L'agitation thermique des atomes dans le milieu cristallin » [1] les expressions des dérivées secondes $C_{\alpha\beta}^{mp}$, troisièmes $D_{\alpha\beta\gamma}^{mpq}$... de l'énergie potentielle en fonction de la dilatation et des dérivées secondes, troisièmes, ... de la même énergie, mais qui se rapportent au milieu cristallin en état inerte, soit sensiblement au zéro absolu de la température.

des dilatations élémentaires, $\Delta\eta_{\beta\delta}$, ($\alpha, \beta, \gamma, \delta = 1, 2, 3$) sont liées par la relation :

$$\Delta T^{\alpha\gamma} = \sum_{\beta\delta} N^{\alpha\gamma, \beta\delta} \Delta\eta_{\beta\delta}.$$

J'ai établi des formules qui donnent les accroissements des tensions $\Delta T^{\alpha\gamma}$ [2]. D'où l'on déduit les dilatations $\Delta\eta_{\beta\delta}$, puis l'énergie potentielle du cristal à la température $\Theta + \Delta\Theta$. Mais les coefficients d'élasticité et les tensions thermiques varient quand le milieu cristallin se dilate. Le calcul de la dilatation ne peut être fait que point par point. Une élévation minimale $\Delta\Theta$ de la température produit une dilatation minimale, qui peut être calculée avec une précision d'autant plus grande que l'élévation de la température est plus petite, en prenant pour données les accroissements des tensions thermiques et les coefficients d'élasticité qui se rapportent à l'énergie potentielle et à l'agitation thermique du cristal à la température initiale Θ . La dilatation connue, on calcule l'énergie potentielle et l'on détermine le régime de l'agitation thermique à la température finale $\Theta + \Delta\Theta$. Puis on répète la même opération qui donne cette énergie et définit ce régime après une nouvelle élévation $\Delta\Theta'$ de la température. Ainsi, de proche en proche, on décèle l'évolution de l'énergie potentielle et celle de l'agitation thermique entre le zéro absolu de la température et le point de fusion.

B. Les facteurs de la dilatation. — Je consacrerai cette étude à la dilatation des cristaux cubiques dont la maille élémentaire renferme un seul atome. Tous ces cristaux sont formés par des métaux. Les uns ont un réseau de cubes centrés (Li, Na, K, Fe, Mo, W, ...) les autres un réseau de cubes à faces centrées (Al, Ni, Cu, Ag, Pt, Au, ...). Toutes leurs oscillations fondamentales sont du genre acoustique. D'autre part, en raison de leur haute symétrie, ils sont le siège d'une tension thermique qui est isotrope ; et leur dilatation a la même propriété. Cela allège le calcul de la dilatation. Néanmoins, la méthode que je suivrai pour définir la dilatation de ces cristaux cubiques s'applique à la dilatation de tous les cristaux ; mais les calculs deviennent de plus en plus lourds quand la symétrie du milieu cristallin s'abaisse et quand les atomes qui constituent le motif cristallin se multiplient.

Je supposerai le milieu cristallin à température uniforme, libre de toute contrainte exercée par le milieu extérieur, et, pour fixer les idées, j'envisagerai un cristal formé de N atomes, qui est donc le siège de $3N$ oscillation fondamentales. J'entends par oscillation fondamentale l'ensemble des oscillations progressives ayant la même fréquence, pilotées par le même vecteur d'onde, faites par tous les atomes du cristal. Ainsi définie, une oscillation fondamentale sera notée $S\tau$, l'indice S rap-

pelant son vecteur d'onde fondamental S , l'indice τ sa fréquence $\nu_{S\tau}$. Les vecteurs d'onde fondamentaux, au nombre de N , sont inscriptibles dans une première zone de L. Brillouin, l'origine au centre de la zone, les extrémités formant un réseau de densité uniforme. Chacun d'eux pilote trois oscillations fondamentales, qui sont rectilignes et orthogonales, l'une sensiblement longitudinale ($\tau = 1$), les deux autres sensiblement transversales ($\tau = 2, 3$).

Je désignerai la température absolue par Θ , la constante de Boltzmann par k , le volume de la maille élémentaire par v , la masse d'un atome par μ , le coefficient de dilatation linéaire par α et le coefficient de dilatation cubique par β

$$\alpha = \frac{1}{l} \frac{dl}{d\Theta}; \quad \beta = \frac{1}{v} \frac{dv}{d\Theta} = 3\alpha.$$

Souvent, je prendrai pour variable

$$x = \frac{\hbar\omega}{k\Theta} \quad (\omega = 2\pi\nu).$$

L'énergie potentielle envisagée sera toujours celle du cristal. Développée en série de Taylor par rapport aux déplacements u^m, u^p, \dots accomplis par les atomes à partir de leurs positions moyennes, cette énergie a pour expression :

$$\begin{aligned} \mathcal{W}(\Theta) = & \left[\mathcal{W}_0 + \frac{1}{2!} \sum_{m,p} \sum_{\alpha\beta} C_{m-p}^{\alpha\beta} u_{\alpha}^m u_{\beta}^p \right. \\ & + \frac{1}{3!} \sum_{m,p,q} \sum_{\alpha\beta\gamma} D_{m-p-q}^{\alpha\beta\gamma} u_{\alpha}^m u_{\beta}^p u_{\gamma}^q \\ & \left. + \dots \right]_{\Theta} \end{aligned} \quad (1)$$

où \mathcal{W}_0 est, à la température Θ , l'énergie potentielle du cristal inerte, les atomes au repos dans leurs positions moyennes. Et les dérivées de cette énergie, $C_{m-p}^{\alpha\beta}, D_{m-p-q}^{\alpha\beta\gamma}, \dots$, dont il sera fait état, seront celles qui se rapportent aux coordonnées des atomes en positions moyennes :

$$\begin{aligned} C_{m-p}^{\alpha\beta} &= C_a^{\alpha\beta} \\ &= \left[\frac{\partial^2 \mathcal{W}_0}{\partial x_{\alpha}^m \partial x_{\beta}^p} \right]_{(x^m = m; x^p = p),} \\ &\quad a \quad m \quad p. \\ D_{m-p-q}^{\alpha\beta\gamma} &= D_{a,b}^{\alpha\beta\gamma} \\ &= \left[\frac{\partial^3 \mathcal{W}_0}{\partial x_{\alpha}^m \partial x_{\beta}^p \partial x_{\gamma}^q} \right]_{(x^m = m; x^p = p; x^q = q),} \\ &\quad b = m - q, \end{aligned} \quad (2)$$

Les composantes harmoniques de l'agitation thermique ne sont pas indépendantes les unes des autres [1]. Les oscillations fondamentales sont liées entre elles par les dérivées troisièmes et sui-

vantes de l'énergie potentielle ; et les oscillations secondaires résultent des interférences entre les oscillations fondamentales. L'énergie libre de l'agitation thermique n'est donc pas celle d'une assemblée d'oscillations harmoniques indépendantes. Néanmoins, je supposerai que chaque oscillation fondamentale conserve sensiblement, à toute température, la même énergie moyenne, W , qu'un oscillateur harmonique de fréquence égale (1) :

$$W = \hbar\omega \left(\frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{k\Theta}} - 1} + \frac{1}{2} \right) \quad (3)$$

Cette hypothèse rend compte, sensiblement, des chaleurs spécifiques mesurées. Aux températures basses et moyennes, c'est-à-dire tant que la température est inférieure à $\frac{2}{3}\Theta_F$, si le cristal fond à la

température Θ_F , l'énergie totale des oscillations secondaires reste minime par rapport à l'énergie totale des oscillations fondamentales ; et les chaleurs spécifiques mesurées se confondent avec celles qui sont prévues par la théorie classique (Debye, Max Born), laquelle suppose l'agitation thermique décomposable en oscillations harmoniques indépendantes et affecte à chacune d'elles l'énergie moyenne d'un oscillateur harmonique. Aux températures élevées, proches du point de fusion, l'énergie moyenne des oscillations secondaires entre en compte. Elle est déterminée par les énergies moyennes des oscillations fondamentales. Et, si l'on attribue à chaque oscillation fondamentale l'énergie $k\Theta$, les chaleurs spécifiques calculées, compte tenu de la part prise à l'énergie thermique par les électrons de conductibilité et, s'il y a lieu, par le magnétisme, se confondent, à peu près, avec celles qui sont mesurées sur les cristaux cubiques envisagés, portés à haute température.

Outre l'énergie moyenne, $W(3)$, des oscillations fondamentales, le calcul de la dilatation fait état des facteurs suivants :

1) La fonction d'Einstein (2) :

$$\mathcal{E} = \frac{1}{k} \left(\frac{\partial W}{\partial \Theta} \right)_{\omega} = \frac{x^2 e^x}{(e^x - 1)^2} \quad (4)$$

(1) Je fais cette hypothèse pour les raisons suivantes. Jusqu'ici, seule a été quantifiée, en toute rigueur, l'énergie d'un oscillateur harmonique. L'agitation thermique du milieu cristallin est un mouvement complexe. Son énergie est définie par une somme de termes nombreux. Et la quantification de cette énergie ne peut être abordée que par le calcul des perturbations, poussé jusqu'à des ordres élevés. Ce calcul est fort long, son résultat incertain. De sorte que l'énergie libre de l'agitation thermique, et partant l'énergie moyenne d'une oscillation fondamentale, échappe présentement à tout calcul précis.

(2) Selon le symbolisme en usage, l'indice ω signifie que la dérivée $\left(\frac{\partial W}{\partial \Theta} \right)_{\omega}$ se rapporte à une pulsation ω constante.

Quand la température se rapproche du zéro absolu, la fonction d'Einstein s'annule. Lorsque la température s'élève, elle croît constamment, et tend vers l'unité dès que x tombe au-dessous de l'unité.

2) La fonction :

$$\mathcal{F} = -\frac{\omega^2}{\hbar} \frac{\partial}{\partial \omega} \left(\frac{W}{\omega^2} \right)_{\Theta} = \frac{1}{2} + \frac{e^x (1+x) - 1}{(e^x - 1)^2} \quad (5)$$

Égale à $1/2$ au zéro absolu de la température, la fonction \mathcal{F} augmente aussi constamment quand la température s'élève et, lorsque x décroît au-dessous de l'unité, elle tend vers $\frac{2k\Theta}{\hbar\omega}$.

3) La dérivée

$$\left(\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \Theta} \right)_{\omega} = \frac{k}{\hbar\omega} y$$

$$y = \frac{x^3 e^x [(x-2)e^x + x + 2]}{(e^x - 1)^3} \quad (6)$$

Quand la température tend vers le zéro absolu, la fonction y s'annule comme $x^4 e^{-x}$. Elle passe par un maximum, égal à 2,69, pour $x = 4,5$, puis quand x décroît à partir de 4,5, elle finit par tendre vers zéro comme $x^3/6$ (fig. 1).

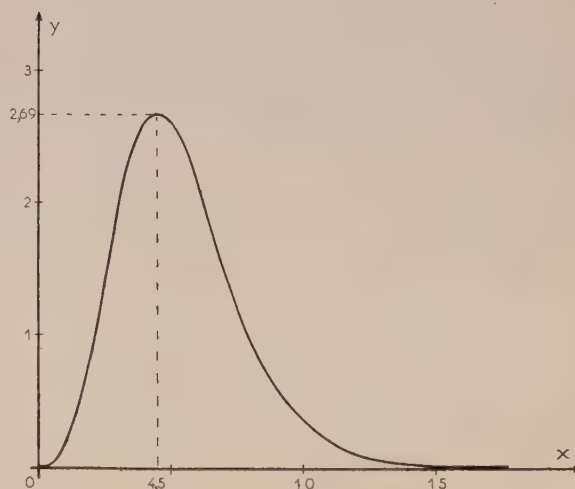


FIG. 1.

4) La dérivée (négative)

$$\frac{\partial}{\partial \omega} \left(\frac{\mathcal{E}}{\omega^2} \right)_{\Theta} = -\frac{x^3 e^x (e^x + 1)}{\omega^3 (e^x - 1)^3} \quad (7)$$

Cette dérivée s'annule quand la température tombe au zéro absolu et, lorsque la température s'élève, elle diminue constamment et tend vers

$$-\frac{2}{\omega^3}.$$

5) Le coefficient

$$C = (c^{11} + 2c^{12})v = 3\Gamma v$$

$$= -\frac{1}{2} \sum_a [C_a^{11} (a^1)^2 + 2C_a^{12} a^1 a^2]; \quad a = m - p, \quad (8)$$

c^{11} et c^{12} sont les coefficients d'élasticité et Γ le coefficient de compressibilité, isothermes, tous rapportés aux constantes de rappel atomiques C_a^{11} , C_a^{12} (contrevariantes, égales aux dérivées secondes de l'énergie potentielle (1-2)).

6) « Les facteurs de structures » $g_{S\tau}$, des oscillations fondamentales. Soient : $2l$ la hauteur de la maille cubique, et l^1 , l^2 , l^3 , 3 vecteurs dirigés suivant ses arêtes et de même module, l . Les translations du réseau cristallin, celles qui transportent un atome sur un autre, peuvent être exprimées :

$$m = m_1 l^1 + m_2 l^2 + m_3 l^3.$$

Les nombres entiers, m_1 , m_2 , m_3 , sont assujettis aux conditions suivantes :

1° Si le réseau est cubique centré, m_1 , m_2 , m_3 , sont tous les trois pairs, ou tous les trois impairs.

2° Si le réseau est cubique à faces centrées, m_1 , m_2 , m_3 , sont tous les trois pairs, ou l'un d'eux est pair et les deux autres impairs (1).

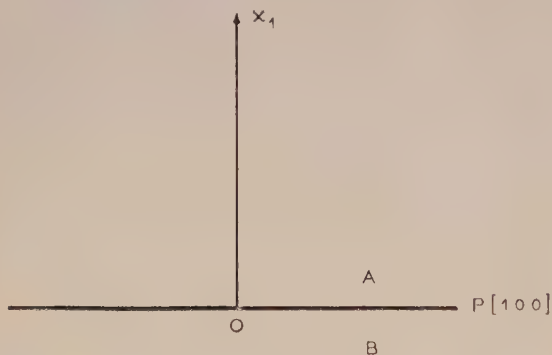


FIG. 2.

Les axes de coordonnées étant dirigés suivant les axes de symétrie quaternaire, envisageons le cristal divisé en deux parties A et B par un plan P (100) ; et calculons la tension thermique principale T_{BA}^{11} [2], de direction et de sens \vec{OX}_1 (fig. 2), (donc normale aux plans 100), exercée par le demi-cristal B sur le demi-cristal A. Pour ce faire, il convient de sommer, selon la méthode que j'ai définie [2], les forces répulsives exercées par les strates 100 véritables, d'épaisseur l , contenues dans la partie B, sur les strates 100, de même épaisseur, contenues dans la partie A. On obtient, par ce procédé, les facteurs $g_{S\tau}$ (positifs) qui se rapportent à la maille élémentaire (2). Et que le réseau soit cubique centré, ou cubique à faces centrées, ces facteurs sont donnés par la même expression :

taire (2). Et que le réseau soit cubique centré, ou cubique à faces centrées, ces facteurs sont donnés par la même expression :

$$g_{S\tau} = - \sum_{\beta\gamma} c_{\beta,S\tau} c_{\gamma,S\tau} \sum_a \left[D_a^{1\beta\gamma} \sin^2 \pi S a + \frac{1}{2} \sum_{b^1=a^1} D_a^{1\beta\gamma} \chi_{ab} + \sum_{|b^1|>|a^1|} D_a^{1\beta\gamma} \chi_{ab} \right] a^1 \quad (9)$$

$$\beta, \gamma = 1, 2, 3,$$

où

$$\chi_{ab} = \sin^2 \pi S a + \sin^2 \pi S b - \sin^2 \pi S (b - a) \quad (10)$$

$$a^1 = n |l^1|; \quad n = \dots; -2; -1; 1; 2; \dots$$

et

$$a = m - p; \quad b = m - q;$$

p et q étant, comme m , des translations du réseau cristallin.

Enfin je ferai état des relations :

$$\frac{dv}{d\theta} = 3\alpha v = \beta v,$$

$$\frac{d\omega}{d\theta} = \frac{d\omega}{dv} \cdot \frac{dv}{d\theta} = 3\alpha v \frac{d\omega}{dv},$$

$$\frac{dg}{d\theta} = \frac{dg}{dv} \cdot \frac{dv}{d\theta} = 3\alpha v \frac{dg}{dv},$$

$$\frac{dC}{d\theta} = \frac{dC}{dv} \cdot \frac{dv}{d\theta} = 3\alpha v \frac{dC}{dv}.$$

Une élévation de la température accroît les tensions thermiques, donc dilate le milieu cristallin, et par là modifie sa structure électronique (4). La

(2) J'ai défini les facteurs $g_{S\tau}$ (notés $2\mathcal{G}_{S\tau}$) qui se rapportent à la maille cubique d'un cristal dont le réseau est formé de cubes centrés ([2], pp. 584, 585, 586) :

$$g_{S\tau} = \sum_{\beta\gamma} c_{\beta,S\tau} c_{\gamma,S\tau} (\Xi_{1,\beta\gamma,S\tau}^1 + \mathcal{S}_{1,\beta\gamma,S\tau}^1 + \Psi_{1,\beta\gamma,S\tau}^1).$$

J'ai rapporté ces facteurs à la maille cubique afin de donner une méthode générale pour évaluer les tensions qui ont lieu dans le milieu cristallin. Mais l'expression obtenue ne se prête pas à des calculs simples. De plus, pour les cristaux envisagés ici, les facteurs $g_{S\tau}$, rapportés aux mailles cubiques, prennent deux formes différentes, l'une propre au réseau de cubes centrés, l'autre au réseau de cubes à faces centrées.

(3) Les constantes de rappel, $D_a^{1\beta\gamma}$, $D_{ab}^{1\beta\gamma}$, qui figurent dans la formule (9) sont égales aux dérivées troisièmes de l'énergie potentielle (1-2) :

$$D_a^{1\beta\gamma} = D_{mnp}^{1\beta\gamma}, \quad D_{ab}^{1\beta\gamma} = D_{mnpq}^{1\beta\gamma} \quad (p \neq q).$$

Elles sont posées contrevariantes, et dans un système orthonormé, elles ont les mêmes modules que les constantes de rappel (covariantes) :

$$D_{1\beta\gamma}^a \quad D_{1\beta\gamma}^b,$$

qui leur correspondent dans les formules 6 et 7 [2] ($j, k = 1, 2$) mais sont de signes opposés.

(4) En particulier, les électrons qui se trouvent au sommet de la bande de Fermi sont portés par l'agitation thermique à des niveaux d'énergie plus élevés que les niveaux où ils étaient primitivement.

(1) Bien entendu, pour définir toutes les translations du réseau, il est nécessaire de prendre, au lieu d'un ou deux nombres pairs, un ou deux zéros.

dilatation et la modification de la structure électronique réduisent l'énergie potentielle du cristal en grandeur absolue ; partant, elles diminuent le coefficient C (8), et affaiblissent dans l'ensemble les pulsations $\omega_{S\tau}$ et les facteurs $g_{S\tau}$. Les dérivés totales $\frac{dv}{d\Theta}$, $\frac{d\omega}{d\Theta}$, $\frac{dg}{d\Theta}$, $\frac{dC}{d\Theta}$, tiennent compte de tous ces effets.

C. Les tensions thermiques. — Il est commode d'exprimer chaque tension thermique par une série [2]. Et dans les cristaux cubiques envisagés, la tension thermique, T , isotrope, définie positive ($g_{S\tau} > 0$) a, de la sorte, pour expression :

$$T = T_1 + T_2 + \dots \quad (12)$$

où le terme T_n (1) est de degré $2n$ par rapport aux amplitudes quadratiques moyennes $A_{S\tau}$ des oscillations fondamentales [2].

La tension principale T_1 [2] peut être formulée

$$T_1 = \frac{Q}{\mu\nu}; \quad (13)$$

$$Q = \frac{1}{N} \sum_{S\tau} \left[\frac{Wg}{\omega^2} \right]_{S\tau}; \quad (14)$$

$$S = 1, 2, \dots, N; \tau = 1, 2, 3,$$

et

$$\left[\frac{Wg}{\omega^2} \right]_{S\tau} = \frac{W_{S\tau} g_{S\tau}}{\omega_{S\tau}^2}.$$

Afin de simplifier les formules, j'écrirai de même, entre deux crochets, affectés de l'indice $S\tau$, des expressions où l'énergie W , la pulsation ω , le facteur g , et les dérivées de ces grandeurs, se rapportent à la même oscillation fondamentale $S\tau$. La somme

$$\sum_{S\tau} \left[\frac{Wg}{\omega^2} \right]_{S\tau}$$

compte $3N$ termes. Donc, sauf si le cristal est extrêmement petit, à une température donnée, le facteur Q (14) est constant, caractéristique de l'espèce cristalline.

Du zéro absolu à la température Θ , la dilatation cubique des cristaux considérés s'élève à

$$\delta(\Theta) = \int_0^\Theta \beta(\Theta) d\Theta. \quad (16)$$

Donc, si la demi-arête de la maille cubique est l_0 au zéro absolu, elle devient, à la température Θ

$$l(\Theta) = l_0 e^{\frac{\delta(\Theta)}{3}},$$

et

$$a_0^1 = a_0 e^{\frac{\delta(\Theta)}{3}}$$

$$a_0^1 = n l_0; n = \dots; -2; -1; 1; 2; \dots \quad (17)$$

Quand la température s'élève, l'énergie poten-

tielle du cristal $\mathcal{W}_{(\Theta)}$ (1) et ses dérivées (2) décroissent en grandeur absolue ; donc les facteurs $g_{S\tau}$ (9) et les pulsations $\omega_{S\tau}$ diminuent aussi. Mais, au cours de toute la dilatation les dérivées

$$\frac{d \text{Log} C_a^{\alpha\beta}}{d \text{Log} v}, \quad \frac{d \text{Log} D_a^{\alpha\beta\gamma}}{d \text{Log} v}, \dots,$$

conservent à peu près la même grandeur (2).

Si les dérivées de l'énergie potentielle sont $C_a^{\alpha\beta}$, $D_a^{\alpha\beta\gamma}$, ..., au zéro absolu, à la température Θ , elles ont sensiblement pour expression :

$$C_{a(\Theta)}^{\alpha\beta} = C_a^{\alpha\beta} e^{-(\varphi_a^{\alpha\beta} + \gamma_a^{\alpha\beta} \delta(\Theta)) \delta(\Theta)},$$

$$D_{a(\Theta)}^{\alpha\beta\gamma} = D_a^{\alpha\beta\gamma} e^{-(\varphi_a^{\alpha\beta\gamma} + \gamma_a^{\alpha\beta\gamma} \delta(\Theta)) \delta(\Theta)} \quad (18)$$

.....
 $\varphi_a^{\alpha\beta}$, $\gamma_a^{\alpha\beta}$, $\varphi_a^{\alpha\beta\gamma}$, $\gamma_a^{\alpha\beta\gamma}$, ... étant des coefficients constants, et

$$|\gamma_a^{\alpha\beta}| \delta(\Theta) \ll |\varphi_a^{\alpha\beta}|, |\gamma_a^{\alpha\beta\gamma}| \delta(\Theta) \ll |\varphi_a^{\alpha\beta\gamma}|, \dots \quad (3)$$

La dilatation thermique des cristaux pris en compte est isotrope. Donc à température croissante, les vecteurs d'onde S gardent tous les mêmes directions dans le réseau cristallin, et leur modules restent dans des rapports constants. De ce fait, les facteurs $e^{i2\pi S a}$, $\sin^2 \pi S a$, χ_{ab} (10) sont invariables. En outre, les « vecteurs propres » $c_{S\tau}$ de composantes $c_{\alpha, S\tau}$ ($\alpha = 1, 2, 3$) ne changent pas considérablement de direction dans le réseau cristallin (4). A ce changement près, négligeable, les facteurs $g_{S\tau}$ (9) sont seulement fonctions des dérivées troisièmes $D_a^{\alpha\beta\gamma}$, $D_{ab}^{\alpha\beta\gamma}$, et de l'arête $2l$ de la maille cubique (par l'intermédiaire des translations a^1) (17).

$$\xi_{S\tau} = - \sum_{\beta\gamma} c_{\beta, S\tau} c_{\gamma, S\tau}$$

$$\left[\sum_a D_{a_0}^{1\beta\gamma} e^{-\left(\varphi_a^{1\beta\gamma} - \frac{1}{3} + \gamma_a^{1\beta\gamma} \delta\right) \delta} \sin^2 \pi S a \right.$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\substack{ab \\ b_1 = a_1}} D_{ab_0}^{1\beta\gamma} e^{-\left(\varphi_{ab}^{1\beta\gamma} - \frac{1}{3} + \gamma_{ab}^{1\beta\gamma} \delta\right) \delta} \chi_{ab}$$

$$+ \left. \sum_{\substack{ab \\ |b_1| > |a_1|}} D_{ab_0}^{1\beta\gamma} e^{-\left(\varphi_{ab}^{1\beta\gamma} - \frac{1}{3} + \gamma_{ab}^{1\beta\gamma} \delta\right) \delta} \chi_{ab} \right] a_0^1. \quad (19)$$

(2) Ce fait sera établi plus loin (formules (64) et (66)).

(3) Les coefficients $\varphi_a^{\alpha\beta}$, $\gamma_a^{\alpha\beta}$, $\varphi_a^{\alpha\beta\gamma}$, $\gamma_a^{\alpha\beta\gamma}$, ... sont, à quelques rares exceptions près, positifs.

(4) Les « vecteurs propres » $c_{S\tau}$ des oscillations fondamentales se confondent sensiblement avec les vecteurs propres des matrices de Fourier (20). Et, si à température croissante, les dérivées secondes $C_a^{\alpha\beta}$ (1-2) diminuaient uniformément (toutes dans la même proportion) les vecteurs propres des matrices de Fourier seraient constants ; donc les vecteurs propres $c_{S\tau}$ ne varieraient pas sensiblement. Quand la température s'élève, la décroissance des dérivées secondes $C_a^{\alpha\beta}$ n'est pas uniforme ; mais les cristaux cubiques formés par les métaux ayant une symétrie élevée, les vecteurs propres $c_{S\tau}$ gardent néanmoins à toute température, à peu près la même direction dans le réseau cristallin.

(1) La tension étant isotrope, nous avons :

$$T_n^{11} = T_n^{22} = T_n^{33} = T_n.$$

D'autre part, les oscillations fondamentales sont entretenues par des forces de rappel qui restent, même si la température est élevée, à peu près linéaire par rapport aux dérivées secondes $C_a^{\alpha\beta}$ ($a = m - p$). De la sorte, les carrés $\omega_{S\tau}^2$ de leurs pulsations se confondent sensiblement avec les valeurs propres de la matrice de Fourier $[\gamma]$ ayant pour éléments :

$$\gamma^{\alpha\beta} = \frac{1}{\mu} \sum_a C_a^{\alpha\beta} e^{i2\pi S a} = -\frac{2}{\mu} \sum_a C_a^{\alpha\beta} \sin^2 \pi S a, \quad (20)$$

donc

$$\omega_{S\tau}^2 = -\frac{2}{\mu} \sum_{\alpha\beta} c_{\alpha,S\tau} c_{\beta,S\tau} \sum_a C_a^{\alpha\beta} e^{-(\varphi_a^{\alpha\beta} + \eta_a^{\alpha\beta} \delta)} \sin^2 \pi S a. \quad (21)$$

Lorsque les distances $|a|$, $|b|$ augmentent, les dérivées $C_a^{\alpha\beta}$, $D_a^{\alpha\beta\gamma}$, $D_{ab}^{\alpha\beta\gamma}$, diminuent vite en grandeur absolue. Partant, les pulsations $\omega_{S\tau}$ (21) et les facteurs $g_{S\tau}$ (19) sont presque entièrement déterminés par les dérivées secondes $C_a^{\alpha\beta}$, et par les dérivées troisièmes $D_a^{\alpha\beta\gamma}$, $D_{ab}^{\alpha\beta\gamma}$, qui portent sur des atomes voisins. Quand la température s'élève, ces dérivées ne décroissent pas uniformément. Mais du zéro absolu au point de fusion, leurs décroissances relatives

$$\frac{|C_a^{\alpha\beta}| - |C_{a(\Theta)}^{\alpha\beta}|}{|C_a^{\alpha\beta}|}; \quad \frac{|D_a^{\alpha\beta\gamma}| - |D_{a(\Theta)}^{\alpha\beta\gamma}|}{|D_a^{\alpha\beta\gamma}|}; \dots,$$

tombent rarement au-dessous de 1/2 et restent donc, dans l'ensemble, du même ordre de grandeur. En outre, chaque carré de pulsation, $\omega_{S\tau}^2$, est fonction de toutes les dérivées secondes $C_a^{\alpha\beta}$, chaque facteur $g_{S\tau}$ de toutes les dérivées troisièmes $D_a^{\alpha\beta\gamma}$, $D_{ab}^{\alpha\beta\gamma}$ (1). Donc si les pulsations $\omega_{S\tau}$ et les facteurs $g_{S\tau}$ prennent les grandeurs $\omega_{S\tau_0}$ et $g_{S\tau_0}$ au zéro absolu, et à la température Θ les grandeurs $\omega_{S\tau(\Theta)}$ et $g_{S\tau(\Theta)}$, quand S et τ varient, à toute température, par un effet de moyenne, les deux affaiblissements

$$\frac{g_{S\tau(\Theta)}}{g_{S\tau_0}} = q_{S\tau(\Theta)}, \quad (22)$$

$$\frac{\omega_{S\tau(\Theta)}^2}{\omega_{S\tau_0}^2} = r_{S\tau(\Theta)}, \quad (23)$$

n'oscillent que faiblement.

Et, à température croissante, l'évolution de tout facteur

$$\xi_{S\tau(\Theta)} = \frac{g_{S\tau(\Theta)}}{\omega_{S\tau(\Theta)}^2} = \frac{g_{S\tau_0}}{\omega_{S\tau_0}^2} \frac{q_{S\tau(\Theta)}}{r_{S\tau(\Theta)}}, \quad (24)$$

(1) Car à toute dérivée $D_a^{1\beta\gamma}$ correspondent deux dérivées $D_a^{2\beta'\gamma'}$, $D_a^{3\beta''\gamma''}$, égales :

$$D_a^{2\beta'\gamma'} = D_a^{3\beta''\gamma''} = D_a^{1\beta\gamma}$$

telles que les translations a' , a'' , se déduisent de la translation a par des rotations de $\frac{2\pi}{3}$ et de $\frac{4\pi}{3}$ autour d'un axe de symétrie ternaire. Les dérivées $D_{ab}^{1\beta\gamma}$ ont la même propriété.

comme celle du facteur moyen

$$\xi(0) = \frac{1}{3N} \sum_{S\tau} \frac{g_{S\tau(\Theta)}}{\omega_{S\tau(\Theta)}^2}, \quad (25)$$

est déterminée par le rapport entre la diminution d'ensemble, en grandeur absolue, des produits $D_a^{\alpha\beta\gamma} \cdot a^1$, $D_{ab}^{\alpha\beta\gamma} \cdot a^1$, et la diminution d'ensemble, de même en grandeur absolue, des dérivées secondes $C_a^{\alpha\beta}$, la première diminution étant définie par les affaiblissements $q_{S\tau(\Theta)}$ (22), la seconde par les affaiblissements $r_{S\tau(\Theta)}$ (23).

Pour une même élévation de la température, la décroissance relative, en grandeur absolue, des dérivées troisièmes $D_a^{\alpha\beta\gamma}$, $D_{ab}^{\alpha\beta\gamma}$, excède dans l'ensemble celle des dérivées secondes $C_a^{\alpha\beta}$ (2). Mais l'augmentation des translations a^1 (17) rétablit approximativement l'égalité entre la diminution relative des produits $D_a^{\alpha\beta\gamma} \cdot a^1$, $D_{ab}^{\alpha\beta\gamma} \cdot a^1$, et celle des dérivées $C_a^{\alpha\beta}$.

En conséquence, du zéro absolu de la température au point de fusion, le facteur moyen $\xi_{S\tau}$ (25) conserve à peu près la même grandeur, caractéristique de l'espèce cristalline ; et la variation relative

$$\frac{|\xi_{S\tau_0}| - |\xi_{S\tau(\Theta)}|}{|\xi_{S\tau_0}|}$$

de tout facteur $\xi_{S\tau}$ reste légère (de quelques centièmes) (3). On a donc grossièrement :

$$\frac{d \text{Log. } \omega_{S\tau}}{d \text{Log. } v} \simeq \frac{1}{2} \frac{d \text{Log. } g_{S\tau}}{d \text{Log. } v}. \quad (26)$$

(2) Les énergies potentielles mutuelles des électrons de conductibilité, celle des ions positifs, celles des électrons de conductibilité et des ions positifs, sont en gros conformes à la loi de Coulomb. Même les énergies d'échange entre les électrons obéissent à cette loi ; et les énergies de Van der Waals résultent d'interactions coulombiennes. Ainsi, l'énergie potentielle d'un cristal relève principalement de la loi de Coulomb. En conséquence, lorsque le milieu cristallin se dilate, les dérivées de son énergie potentielle (1-2) décroissent, en grandeur absolue, d'autant plus rapidement que leur ordre est plus élevé.

(3) Si les égalités

$$\varphi_a^{\alpha\beta} = \varphi_2, \quad \eta_a^{\alpha\beta} = \eta_2,$$

$$\text{et} \quad \varphi_a^{\alpha\beta\gamma} = \varphi_{ab}^{\alpha\beta\gamma} = \varphi_3, \quad \eta_a^{\alpha\beta\gamma} = \eta_{ab}^{\alpha\beta\gamma} = \eta_3,$$

étaient satisfaites, on aurait :

$$\xi_{S\tau} = \frac{g_{S\tau_0}}{\omega_{S\tau_0}^2} e^{-[\varphi_3 - (1/3) - \varphi_2 + (\eta_3 - \eta_2)\delta]\delta}$$

et les égalités

$$\varphi_3 - \frac{1}{3} = \varphi_2, \quad \eta_3 = \eta_2$$

entraînerait la relation :

$$\xi_{S\tau} = \frac{g_{S\tau_0}}{\omega_{S\tau_0}^2} = \text{constante.}$$

C'est la décroissance non uniforme des dérivées $D_a^{1\beta\gamma}$, $D_{ab}^{1\beta\gamma}$ et $C_a^{\alpha\beta}$ qui fait que les différents facteurs $\xi_{S\tau}$ ne varient pas de même avec la dilatation $\delta_{S\tau}$, donc avec la température Θ , mais leurs variations restent minimes.

Soit $\nu_m \left(\frac{\Theta_F}{2} \right)$ la fréquence moyenne des oscillations fondamentales, qui ont lieu dans le cristal à la température moyenne $\frac{\Theta_F}{2}$. Si ces oscillations ont des fréquences distribuées selon une densité $\rho(\nu)$ entre les deux limites ν_l et ν_L ($\nu_l < \nu_L$),

$$\int_{\nu_l}^{\nu_L} \rho(\nu) d\nu = 3.N,$$

et

$$\nu_m \left(\frac{\Theta_F}{2} \right) = \frac{1}{3.N} \int_{\nu_l}^{\nu_L} \rho(\nu) \nu d\nu. \quad (27)$$

J'évaluerai les tensions secondaires T_2, T_3, \dots (formule 12) au moyen des expressions :

$$T_2 = \frac{b}{\mu\nu} W_m^2, \quad (28)$$

$$T_3 = \frac{c}{\mu\nu} W_m^3, \quad (29)$$

où b et c sont des coefficients constants, positifs, propres à l'espèce cristalline, et où l'énergie moyenne W_m est celle d'un oscillateur harmonique dont la fréquence, $\nu_m \left(\frac{\Theta_F}{2} \right)$, est constante (indépendante de la température (3-4)).

Ces expressions des tensions secondaires sont approximatives ; et, parmi les approximations faites, deux d'entre elles sont particulièrement importantes.

1° Aux basses températures, chaque oscillation fondamentale S_τ prend en moyenne dans le temps, une énergie W_{S_τ} (3) qui lui est propre ; car cette énergie est fonction de sa pulsation ω_{S_τ} , laquelle diminue lorsque le milieu cristallin se dilate. A ces énergies individuelles W_{S_τ} est substituée dans les expressions (28) et (29) une énergie moyenne, W_m , fonction uniquement de la température puisqu'elle se rapporte à une fréquence constante $\nu_m \left(\frac{\Theta_F}{2} \right)$ (27).

Donc si la température du cristal est basse $\left(\Theta < \frac{\Theta_F}{4} \right)$, cette substitution entraîne une forte erreur sur la grandeur des tensions secondaires. Mais aux basses températures, les tensions secondaires restent minimales par rapport à la tension principale T_1 , et une lourde erreur sur leur grandeur n'affecte que légèrement la tension globale T (12) et celle des dérivées $\frac{dT}{d\Theta}$ et $\frac{d^2T}{d\Theta^2}$ (1).

2° Si la température du cristal est élevée

(1) La tension globale T est fonction de la température et de la pression. Mais le cristal étant supposé sous une pression nulle, $\frac{dT}{d\Theta}$ et $\frac{d^2T}{d\Theta^2}$, sont des dérivées totales, fonction uniquement de la température.

$\left(\Theta > \frac{2}{3} \Theta_F \right)$, selon notre hypothèse, toutes les oscillations fondamentales ont sensiblement la même énergie moyenne, $k\Theta$, qui est indépendante de leur fréquence. Donc remplacer les énergies individuelles W_{S_τ} par l'énergie moyenne W_m n'entraîne pas non plus une erreur notable sur la grandeur de la tension globale et sur celle des dérivées $\frac{dT}{d\Theta}$, $\frac{d^2T}{d\Theta^2}$.

La tension T_2 est fonction linéaire des facteurs

$$\xi_{S_\tau, S'_{\tau'}} = \frac{g_{S_\tau, S'_{\tau'}}}{\omega_{S_\tau}^2 \omega_{S'_{\tau'}}^2} \quad (30)$$

la tension T_3 des facteurs

$$\xi_{S_\tau, S'_{\tau'}, S''_{\tau''}} = \frac{g_{S_\tau, S'_{\tau'}, S''_{\tau''}}}{\omega_{S_\tau}^2 \omega_{S'_{\tau'}}^2 \omega_{S''_{\tau''}}^2}. \quad (31)$$

Et les coefficients b et c sont respectivement les grandeurs moyennes, prises sur toutes les oscillations fondamentales, des facteurs $\xi_{S_\tau, S'_{\tau'}}$ et $\xi_{S_\tau, S'_{\tau'}, S''_{\tau''}}$.

Les facteurs $g_{S_\tau, S'_{\tau'}}$ et $g_{S_\tau, S'_{\tau'}, S''_{\tau''}}$ sont comme les facteurs g_{S_τ} (9) proportionnels à l'arête $2l$ de la maille cubique. Et, les oscillations secondaires négligées, chaque facteur $g_{S_\tau, S'_{\tau'}}$ varie linéairement avec les dérivées cinquièmes de l'énergie potentielle $W_0(\Theta)$ (1), chaque facteur $g_{S_\tau, S'_{\tau'}, S''_{\tau''}}$ varie linéairement avec les dérivées septièmes de la même énergie. D'autre part, les produits $\omega_{S_\tau}^2 \omega_{S'_{\tau'}}^2$ et $\omega_{S_\tau}^2 \omega_{S'_{\tau'}}^2 \omega_{S''_{\tau''}}^2$ sont sensiblement des fonctions quadratiques et cubiques des dérivées secondes $C_a^{\alpha\beta}$ (2-18) (1). En majeure partie l'énergie potentielle du milieu cristallin obéit à la loi de Coulomb. Par conséquent, pour une même élévation de la température, les dérivées cinquièmes de l'énergie potentielle décroissent dans l'ensemble, en grandeur absolue, à peu près dans la même proportion que les carrés des dérivées secondes ; et, dans l'ensemble aussi, en grandeur absolue, les dérivées septièmes diminuent un peu moins que les cubes des dérivées secondes. Donc, à température croissante, l'arête de la maille cubique se dilatant, les facteurs $\xi_{S_\tau, S'_{\tau'}}$ et surtout les facteurs $\xi_{S_\tau, S'_{\tau'}, S''_{\tau''}}$ augmentent dans l'ensemble, et partant les coefficients b et c grandissent. Mais du zéro absolu de la température au point de fusion, la dilatation cubique $\delta(\Theta)$ (16) ne s'élève qu'à quelques centièmes ; il est donc à présumer que dans le même intervalle de température les coefficients b et c ne croissent que dans une proportion minime par rapport à leurs grandeurs au zéro absolu.

Même quand le cristal est à une température élevée, à peine inférieure à la température de

(1) Je suppose les oscillations fondamentales entretenues par des forces de rappel linéaires par rapport aux dérivées secondes et les vecteurs propres c_{S_τ} (de composantes c_{α, S_τ} ; $\alpha = 1, 2, 3$) constants.

fusion, les tensions secondaires n'entrent dans la tension globale que pour une faible proportion (de l'ordre de 10^{-1}). Donc, même si les facteurs $\xi_{S\tau, S'\tau'}$, $\xi_{S\tau, S'\tau', S''\tau''}$ augmentent considérablement quand le milieu cristallin se dilate, cela n'entraîne qu'un accroissement minime de la tension globale.

Mais le coefficient de dilatation linéaire α est, en gros, proportionnel à la dérivée $\frac{dT}{d\Theta}$, et sa variation en fonction de la température est principalement déterminée par la dérivée $\frac{d^2T}{d\Theta^2}$.

La comparaison des coefficients de dilatation définis par cette théorie et des coefficients d'élasticité mesurés, révèle d'abord que les tensions secondaires T_2 , T_3 , ..., s'exercent dans le même sens que la tension principale T_1 , puis qu'aux températures élevées proches du point de fusion, la somme positive

$$\frac{dT_2}{d\Theta} + \frac{dT_3}{d\Theta},$$

reste plus petite mais est du même ordre de gran-

deur que la dérivée $\frac{dT_1}{d\Theta}$, et que la somme

$$\frac{d^2T_2}{d\Theta^2} + \frac{d^2T_3}{d\Theta^2},$$

positive aussi, devient, en valeur absolue, beaucoup plus grande que la dérivée $\frac{d^2T_1}{d\Theta^2}$, laquelle décroît et finit par être négative quand la température est voisine du point de fusion.

En conséquence, si les facteurs $\xi_{S\tau, S'\tau'}$ (30) $\xi_{S\tau, S'\tau', S''\tau''}$ (31) augmentent notablement quand la température s'élève, cette augmentation entraîne aux températures élevées, un accroissement sensible du coefficient de dilatation.

Même aux températures élevées, la tension T_2 reste minime par rapport à la tension T_1 , et la tension T_3 reste minime par rapport à la tension T_2 . La série (12) qui exprime la tension globale converge rapidement. Et pour calculer le coefficient de dilatation je ne retiendrai que les tensions secondaires T_2 et T_3 .

Manuscrit reçu le 11 avril 1961.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] LAVAL (J.), *J. Physique Rad.*, 1959, **20**, (1), 1 et **20**, (4), 449.
- [2] LAVAL (J.), *J. Physique Rad.*, 1959, **20**, 6, 577.
- [3] LÖWDIN (P. O.), *Arkiv Matematik, Astronomi och Fysik*, 1949, **35 A**, 9, 1 ; **35 A**, 30, 1.
- [4] LUNDVQUIST (B. S.), *Arkiv Physik*, 1955, **9**, 29, 435.
- [5] LAVAL (J.), *J. Physique Rad.*, 1957, **18**, 247, 289, 369.

LETTRES A LA RÉDACTION

REMARQUES
SUR L'UTILISATION DES POUDRES
DANS LES ÉMULSIONS NUCLÉAIRES

Par CAO XUAN CHUAN et NGUYỄN BICH NHU,
Office de l'Énergie Atomique, Saïgon

Une des techniques récentes dans l'étude des réactions nucléaires par les émulsions nucléaires consiste à incorporer des poudres de la matière à étudier entre deux couches d'émulsion et à observer les étoiles de désintégration issues de ces grains [1, 2].

Mais cette méthode introduit deux nouvelles difficultés :

1. On ne voit pas l'origine des désintégrations. En effet les particules chargées issues de la désintégration ne laissent des traces observables qu'une fois sorties des grains. Si ces particules n'ont pas assez d'énergie pour s'échapper du grain, le phénomène est perdu. Cet effet entraîne donc une imprécision dans l'interprétation des résultats. Il serait intéressant de pouvoir faire une estimation théorique de l'importance de ce phénomène et de faire les corrections nécessaires dans la statistique finale.

2. Durant son parcours à l'intérieur du grain, la particule peut subir des chocs contre les noyaux du milieu. Ces chocs provoquent des déviations des trajectoires et entraînent des perturbations dans l'étude des distributions angulaires.

Évidemment les corrections sont d'autant plus faibles que le diamètre des grains est plus petit (corrections sur les parcours aussi bien que sur les angles). Mais on est limité pour réduire le diamètre des grains, lorsque les sections efficaces sont faibles. Si le diamètre moyen est trop petit, très peu de désintégrations se produiront dans les grains.

Dans l'étude présente, nous nous proposons de faire une analyse théorique du premier de ces deux effets.

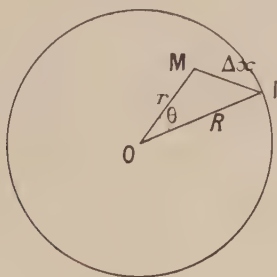


FIG. 1.

Pour simplifier le problème nous supposons que les grains sont des sphères de rayon R .

Soit une particule α émise avec une énergie E à

l'intérieur du grain. Pour que cette particule soit observable, nous devons avoir :

$$E - \Delta E > E_m \quad (1)$$

ΔE étant la perte d'énergie de la particule dans la sphère.

E_m étant l'énergie minima pour que la trace de la particule α soit observable dans l'émulsion.

Nous prendrons pour

$$\text{les } \alpha \quad E_m = 0,2 \text{ MeV environ}$$

$$\text{les ions } {}^9\text{Be} \quad E_m = 0,4 \text{ MeV environ.}$$

D'après la relation de Bethe [3], on peut écrire :

$$\frac{\Delta E}{\Delta x} = f(E) = \frac{4\pi e^4 z^2 NZ}{mv^2} \ln \frac{2mv^2}{kZ}. \quad (2)$$

Nous supposons négligeable la perte d'énergie dans le grain de sorte que $f(E)$ ne varie pratiquement pas pendant ce parcours
 ze : charge de la particule.

Z : numéro atomique des atomes constituant du grain.

m : masse électronique.

v : vitesse de la particule.

N : nombre d'atomes par cm^3 du milieu traversé.

L'inégalité (1) peut s'écrire :

$$E - f(E) \Delta x > E_m$$

ou

$$\Delta x < \frac{E - E_m}{f(E)} = B \quad (3)$$

B est défini comme le plus grand parcours permis pour la particule dans la sphère, c'est-à-dire que si ce parcours est plus grand que B la particule ne peut pas laisser une trace observable.

Supposons que la particule α soit émise au point M . O est le centre de la sphère. Posons

$$OM = r.$$

La particule α suit la trajectoire MI pour sortir du grain

$$MI = \Delta x \quad \widehat{IOM} = \theta.$$

Nous avons

$$(\Delta x)^2 = R^2 + r^2 - 2Rr \cos \theta. \quad (4)$$

De (3) et (4) nous tirons :

$$R^2 + r^2 - 2Rr \cos \theta \leq B^2$$

ou

$$\cos \theta > \frac{R^2 + r^2 - B^2}{2Rr} = K.$$

Une discussion simple montre que la probabilité pour que $\cos \theta$ soit supérieure à K est

$$\begin{aligned} p &= 1 & \text{si} & & K < -1 \\ p &= 0 & \text{si} & & K > +1 \\ p &= \frac{1 - \cos \varphi}{2} & \text{si} & & -1 \leq K \leq +1 \end{aligned} \quad (4)$$

φ étant l'angle sur le cercle trigonométrique défini par $\cos \varphi = K$ (fig. 2).

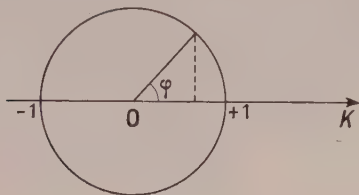


FIG. 2.

D'autre part, la probabilité p' pour que le point M soit à l'intérieur d'une couronne sphérique de rayons r et $r + dr$ est :

$$dp' = \frac{4\pi r^2 dr}{(4/3)\pi R^3} = \frac{3r^2 dr}{R^3}.$$

La probabilité pour que la particule α soit observée est le produit pp' . En faisant l'intégration sur toute la sphère nous aurons :

$$\begin{aligned} P &= \int_0^R \frac{3r^2 dr}{R^3} \cdot \frac{1 - \cos \varphi}{2} \\ &= \int_0^R \frac{3r^2 dr}{R^3} \frac{1}{2} \left\{ 1 - \frac{R^2 + r^2 - B^2}{2Rr} \right\} \end{aligned}$$

d'où

$$P = \frac{3B^2}{8R^2} - \frac{1}{16} = \frac{3}{8R^2} \left[\frac{E - E_m}{f(E)} \right]^2 - \frac{1}{16}, \quad (5)$$

On distingue deux valeurs de E : E_{\min} et E_{\max} pour lesquelles $P = 0$ et $P = 1$.

Les corrections doivent être faites lorsque $E_{\min} < E < E_{\max}$. Si $E < E_{\min}$ la particule ne peut pas laisser de trace observable dans l'émulsion tandis qu'on peut toujours l'observer si $E \geq E_{\max}$.

Deux facteurs entrent en jeu dans notre problème :

1) L'énergie de la particule α , E au moment de l'émission. 2) Le rayon R du grain incorporé dans l'émulsion. En général l'énergie E est imposée par les conditions expérimentales. Dans ce cas, la relation (5) permet de choisir le rayon R de manière à éviter ces corrections et de se mettre ainsi dans les conditions d'observation les plus favorables.

Comme exemple nous avons construit des courbes montrant les variations de la probabilité P avec l'énergie E pour différents rayons R pour les particules α et les ions ^9Be dans le cas des grains de diamant [1]. Pour construire ces courbes, nous supposons que la constante k de la formule (2) est $k = 11,2$ eV. En outre l'énergie minima E_{\min} pour que la trace soit observable

est supposée égale à 0,2 MeB pour la particule α et égale à 0,4 MeV pour l'ion ^9Be (fig. 3).

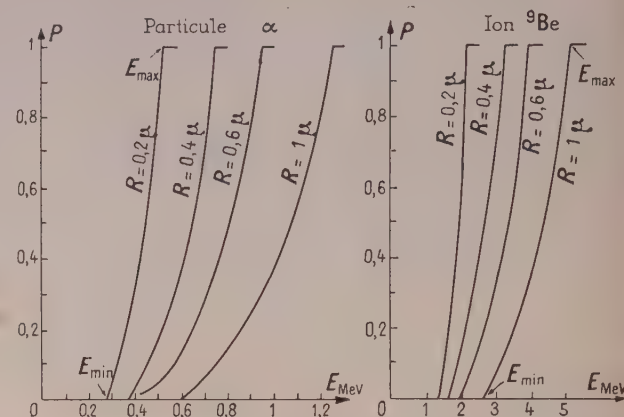


FIG. 3. — Variation de P en fonction de l'énergie. P probabilité d'observation de la particule. E énergie de la particule au moment de l'émission. R rayon des grains.

Cette méthode peut être bien entendu utilisée pour d'autres particules chargées et dans le cas où plusieurs atomes de nombre atomique différent sont présents dans le grain.

Qu'il nous soit permis d'exprimer ici notre vive reconnaissance à M. R. CHASTEL, Professeur à la Faculté des Sciences de Bordeaux, pour les précieux conseils dont nous avons bénéficiés au cours de ce travail.

Lettre reçue le 26 mai 1961.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] CAO XUAN et CHASTEL (R.), Communication au 2^e colloque international de photographie corpusculaire, Montréal 1958.
- [2] ANSEROVA (M. S.), NEMILOV (Z. A.), FOURCHTEIN (B. I.), Priboi i Teck. Ekspt N 1 1959.
- [3] The Atomic nucleus Evans 637 Mc Graw Hill Book Co.
- [4] Probabilité Erreurs par Borel et Deltheil, 120, Armand Colin.

STRUCTURE HYPERFINE DU PRASÉODYME DANS LES SOLIDES

Par Yves AYANT et Élie BELORIZKY,

Laboratoire d'Électrostatique et de Physique du Métal
Laboratoire de Physique Générale

Le praséodyme est l'un des métaux de terres rares possédant un isotope unique doué de spin, donc favorable à l'étude expérimentale de structure hyperfine. (Le noyau Pr possède les caractéristiques suivantes : $I = 5/2$, $\mu = 3,8$ MBN ; $Q = -0,054 \cdot 10^{-24}$ cm²).

Dans cet article, nous allons successivement étudier les cas d'ions Pr^{4+} et Pr^{3+} dans un site cubique pur.

1° **Cas de l'ion Pr^{4+} .** — La valence 4 du Pr est connue ; il semble qu'on puisse réaliser l'ion Pr^{4+} comme inclusion dans la thorine. L'ion Pr^{4+} est un système $(4f)^1$ dont le fondamental est $^2F_{5/2}$, lequel se décompose dans un champ cubique en 2 niveaux appartenant aux représentations Γ_7 et Γ_8 ; c'est le niveau quadruple Γ_8 qui est le plus bas. (Lorsque l'environnement est un cube de charges négatives, ce qui est le cas.)

En tenant compte du spin nucléaire, le niveau fondamental appartient à la représentation $\Gamma_8 \times D_{5/2}$ (D_J étant la représentation usuelle du groupe des rotations, mais restreinte évidemment, ici, au groupe du cube). On calcule aisément la réduction :

$$\Gamma_8 \times D_{5/2} = \Gamma_1 + \Gamma_2 + 2\Gamma_3 + 3\Gamma_4 + 3\Gamma_5.$$

Nous voyons ainsi que le multiplet hyperfin (du fondamental Γ_8) comprend 2 niveaux simples, 2 niveaux doubles et 6 niveaux triples.

On traite le fondamental Γ_8 comme un niveau quadruple d'un atome libre, auquel on associe un moment cinétique fictif \mathbf{J}' , tel que $J' = 3/2$. On définit les états $|M_{J'}\rangle$ en fonction des $|\overline{M_J}\rangle$ (où M_J est le vrai nombre quantique magnétique associé à \mathbf{J}) par :

$$\begin{aligned} |3/2\rangle &= (5/6)^{1/2} |\overline{5/2}\rangle + (1/6)^{1/2} |\overline{3/2}\rangle \\ |1/2\rangle &= |\overline{1/2}\rangle ; | -1/2\rangle = |\overline{-1/2}\rangle \\ | -3/2\rangle &= (5/6)^{1/2} |\overline{-5/2}\rangle + (1/6)^{1/2} |\overline{-3/2}\rangle \end{aligned}$$

Et on vérifie que les composantes J_k du moment cinétique \mathbf{J} ont des éléments de matrice entre $\langle M_{J'} |$ et $|M_{J'}\rangle$ données par la relation :

$$J_k = \frac{23}{18} J'_k - \frac{10}{9} J_k^2.$$

Pour obtenir les niveaux hyperfins issus du niveau fondamental électronique Γ_8 , il suffit de diagonaliser le couplage hyperfin $H = A \mathbf{I} \cdot \mathbf{J}$. La constante A a été estimée à $0,043 \text{ cm}^{-1}$ d'après une étude sur le fondamental $^4I_{9/2}$ de Pr $I^{(1)}$. Le plus simple est de travailler dans la base $|M_I\rangle |M_{J'}\rangle$ où M_I est le nombre quantique magnétique nucléaire, en remarquant que seuls existent les éléments de matrice obéissant à la règle de sélection.

$$\Delta(M_I + M_{J'}) = 0, \pm 4.$$

En réduisant la matrice primitive d'ordre 24, on trouve une sous matrice correspondant à $M_I + M_{J'} = 0, \pm 4$, d'ordre 6 mais symétrique par rapport à son centre, ce qui ramène à des problèmes d'ordre 3 ; de même on trouve une sous matrice correspondant à $M_I + M_{J'} = \pm 2$ ayant les mêmes propriétés. On trouve pour 12 $\mathbf{I} \cdot \mathbf{J}$ les valeurs propres suivantes :

$$\Gamma_1 - 65 ; \Gamma_2 - 33 ; \Gamma_3 42,1, - 56,1 ;$$

$$\Gamma_4 64,87 ; 24,68 ; - 60,55$$

$$\Gamma_5 47,97 ; 12,18 ; - 47,15.$$

Ci-contre le diagramme des niveaux (fig. 1).

L'écartement total du multiplet est de $0,46 \text{ cm}^{-1}$.

Remarques : 1) Le terme quadrupolaire, très faible,

(ordre de grandeur 10^{-4} cm^{-1}) n'introduit aucune décomposition supplémentaire ; il a par conséquent été négligé dans cette étude.

2) Effet Zeeman : Au 1^{er} ordre, il est nul pour les niveaux $\Gamma_1, \Gamma_2, \Gamma_3$ et isotrope pour les niveaux Γ_4 et Γ_5 ; cela est important car il serait possible de faire des expériences de résonance paramagnétique sur une poudre, à condition d'utiliser un champ magnétique assez faible.

2° **Cas de l'ion Pr^{3+} .** — Le niveau fondamental de l'ion Pr^{3+} libre $(4f)^2$ est 3H_4 , qui en potentiel cubique pur se décompose en $\Gamma_1 + \Gamma_3 + \Gamma_4 + \Gamma_5$; les valeurs de ces niveaux sont proportionnelles à 14 (Γ_1) ; 7 (Γ_4) ; $2(\Gamma_3) - 13(\Gamma_5)$ dans l'hypothèse vraisemblable où le potentiel cristallin du 6^e ordre est négligeable — le signe correspondant toujours à 8 charges — au sommet d'un cube).

Le fondamental de l'ion est ainsi un niveau (électronique) triple Γ_5 , auquel on associe, comme plus haut, un moment cinétique fictif \mathbf{J}' avec $J' = 1$. Il convient de poser :

$$\begin{aligned} |1\rangle &= (7/8)^{1/2} |\overline{3}\rangle - (1/8)^{1/2} |\overline{1}\rangle \\ |0\rangle &= (1/2)^{1/2} |\overline{2}\rangle - (1/2)^{1/2} |\overline{-2}\rangle \\ | -1\rangle &= - (7/8)^{1/2} |\overline{-3}\rangle + (1/8)^{1/2} |\overline{-1}\rangle \end{aligned}$$

avec les mêmes conventions que plus haut. Dans la base $|M_{J'}\rangle$ on trouve aisément que $\mathbf{J} = \frac{5}{2} \mathbf{J}'$ (1).

Au premier ordre du calcul des perturbations, nous avons donc, pour le couplage hyperfin magnétique, à traiter la matrice $A \mathbf{I} \cdot \mathbf{J}$. En remplaçant \mathbf{J} selon (1), on obtient un couplage $H = A' \mathbf{I} \cdot \mathbf{J}'$ (2) (A' a été estimé à $0,092 \text{ cm}^{-1}$ de la même façon que A (1) ; (2) se

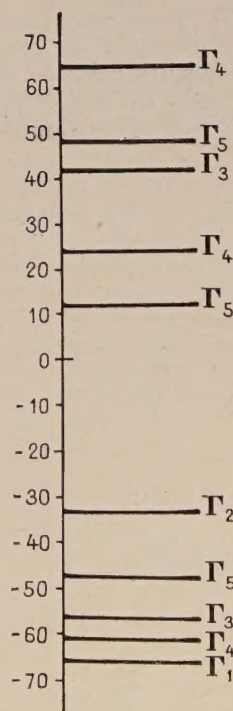


FIG 1.

résout aisément en introduisant $F' = I. + J'$ et on obtient 3 niveaux $F' = 7/2, 5/2, 3/2$.

En fait ces niveaux sont respectivement associés aux représentations.

$$\Gamma_2 D_{7/2} = \Gamma_6 + \Gamma_7 + \Gamma_8; \Gamma_2 D_{5/2}$$

$$= \Gamma_6 + \Gamma_8; \Gamma_2 D_{3/2} = \Gamma_8.$$

Donc un calcul plus poussé faisant intervenir le 2^{ème} ordre du couplage magnétique et le 1^{er} ordre du couplage quadrupolaire, fera apparaître une décomposition supplémentaire. *A priori* ces deux effets se traduisent par un hamiltonien effectif H' ajouté à H et qui sera de la forme :

$$H' = a I \cdot J' + b (I \cdot J')^2 + c + d \sum_k I_k^2 J_k'^2.$$

Seul le terme en d joue un rôle : a, b, c , ne donnent lieu à aucune décomposition des niveaux F' , mais seulement à un très léger déplacement.

Tous calculs faits, la contribution à d du terme magnétique au 2^{ème} ordre est : $\frac{27}{50} \frac{A'^2}{\Delta E}$ où ΔE est l'écartement des deux plus bas niveaux cristallins.

La contribution du terme quadrupolaire, est de $-\frac{35}{2} 10^{-6} \text{ cm}^{-1}$. Le calcul de la décomposition se présente ainsi ; on passe en base $|F', M_{F'}\rangle$ et il suffit de former les sous matrices

$$\langle F', M'_{F'} | H | F', M_{F'} \rangle$$

Si $F' = 7/2$ et $5/2$, ces sous matrices sont nécessairement du type bien connu $\alpha H(F') + \beta$

$$H(F') = F_x'^4 + F_y'^4 + F_z'^4 - \frac{3}{2F' + 1} \text{Tr } F_z'^4.$$

Les matrices $H(F')$ sont les mêmes que celles qu'on rencontre pour représenter les couplages cristallins du 4^{ème} ordre en symétrie cubique ; il est aisé d'obtenir leurs valeurs propres. En calculant directement des éléments de matrice simples, on trouve :

Pour $F' = 7/2$

$$\alpha = \frac{d}{21}, \beta = \frac{13}{2} d.$$

Pour $F' = 5/2$

$$\alpha = -\frac{4}{35} d, \beta = \frac{37}{10} d$$

et on utilise le fait que les matrices $H(F')$ ont respectivement les valeurs propres :

$$H^{(7/2)} \quad 42(\Gamma_6); \quad 6(\Gamma_8); \quad -54(\Gamma_7)$$

$$H^{(5/2)} \quad 6(\Gamma_8); \quad -12(\Gamma_7)$$

Cela fournit la décomposition des niveaux $F' = 7/2$ et $5/2$. Le niveau $F' = 3/2$ ne subit aucune décomposition.

(La décomposition supplémentaire n'est pas à l'échelle sur la figure 2.)

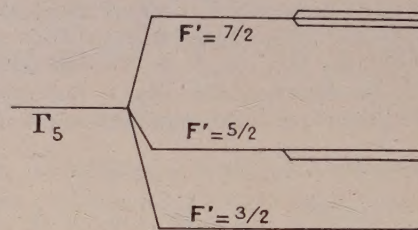


FIG. 2.

Conclusion. — Nous étudions actuellement le Pr en présence de champ cristallin non parfaitement cubique, le terme supplémentaire pouvant être tétra-gonal, trigonal, ou même comme dans le cas des gal-lates, totalement dépourvu de symétrie.

Lettre reçue le 26 mai 1961.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] Low, *Phys. Rev.*, 1953, **91**, 619.

COMMUNICATION A LA SOCIÉTÉ FRANÇAISE DE PHYSIQUE

L'ÉMISSION PHOTOÉLECTRIQUE :
EFFET DE SURFACE, EFFET DE VOLUME

Par P. VERNIER,

Faculté des Sciences de Dijon

Malgré de nombreux travaux, l'origine des électrons émis par les solides n'est pas encore éclaircie. Nous définirons d'abord le problème dans un schéma corpusculaire :

Dans un solide, un électron subit l'action d'un photon qui le fait passer d'un état k à un état l . Dans le premier état, l'électron ne peut traverser la surface du solide, dans le second il a une probabilité p_l de le faire. Cette interaction doit conserver la quantité de mouvement et l'énergie entre le photon absorbé, l'électron excité et le solide. L'action du solide est nécessaire, car l'énergie échangée entre un électron libre et un photon lumière dans l'effet Compton est négligeable. On peut distinguer trois types de transitions :

1) Effet de surface : La conservation de la quantité de mouvement est assurée grâce à l'action sur l'électron du champ électrique superficiel qui enferme les électrons non excités dans le solide.

2) Effet de volume : La conservation de la quantité de mouvement est assurée grâce à l'action du champ périodique qui règne dans le solide.

3) Effet de défaut : On peut encore envisager une action des champs perturbateurs dus aux impuretés et autres défauts, superficiels et profonds. Les caractères de l'émission photoélectrique qui en résulte sont fondamentalement différents des précédents. C'est pourquoi, nous le classerons à part sous le nom d'effet de défaut.

L'effet de surface peut être seul envisagé dans l'hypothèse où les électrons sont libres dans un métal parfait. A partir du modèle de Sommerfeld on peut ainsi calculer la répartition spectrale du rendement quantique et la répartition énergétique des électrons émis. L'accord est relativement satisfaisant près du seuil, mais, d'après Mayer [2] une théorie fondée sur un effet de volume pourrait donner des résultats très voisins.

Le point de vue ondulatoire. — Pour tenir compte de la polarisation de la lumière, il convient de décrire celle-ci par une onde. Une théorie mixte, ondulatoire pour la lumière et corpusculaire pour les électrons peut donner des résultats mais nous adopterons ici une description purement ondulatoire.

L'état électronique d'un volume V de solide peut être décrit par un ensemble fini de fonctions d'ondes, orthogonales entre elles et normées sur le volume V :

$$\varphi_k(r) = u_k(r) \exp\left(-2\pi j \frac{E_k t}{h}\right),$$

A l'intérieur d'un cristal parfait, $\varphi_k(r)$ peut être mise sous la forme :

$$\varphi_k(r) = u_k(r) \exp 2\pi j k r \quad (2)$$

où $u_k(r)$ est une fonction possédant la triple périodicité du cristal et k un vecteur pris dans la première zone de Brillouin. Dans le voisinage de la surface d'un cristal parfait $\varphi_k(r)$ peut être mis sous la forme :

$$\varphi_k(r) = v_{k_l}(r) \exp 2\pi j k_l r \quad (3)$$

k_l représente la composante du vecteur k parallèle à la surface et $v_{k_l}(r)$ est une fonction possédant la double périodicité de la face de sortie du cristal.

Dans le voisinage d'une impureté u_k et v_{k_l} perdent tout caractère périodique.

L'onde ψ_k ne s'annule pas aux limites du volume V . En fait, pour les états électroniques normalement occupés dans le solide, elle présente vers l'extérieur du solide une forme évanescence à laquelle aucun courant n'est associé.

L'influence d'un champ électromagnétique variable peut être considérée comme une faible perturbation apportée à l'équation du Schrödinger dont les ψ_k sont les solutions non perturbées. Pour représenter l'état électronique du solide, on peut, dans une première approximation, remplacer chaque ψ_k par la somme :

$$\psi_k + c_{kl}(t) \psi_l \quad (4)$$

où ψ_l représente une fonction d'onde, solution de l'équation de Schrödinger non perturbée, mais correspondant à un état électronique d'énergie E_l trop élevé pour être occupé normalement. Si on tenait compte de toutes les actions subies par les électrons, notamment de celles qui sont responsables de l'effet Joule dans les conducteurs qui ferment le circuit photoélectrique, $c_{kl}(t)$ serait une constante. En composant les densités de courant associées à tous les termes $c_{kl}(t)$, pour tous les vecteurs k et l , à l'extérieur du solide, on obtiendrait un courant photoélectrique stationnaire.

Il est plus commode de ne faire intervenir que le champ électromagnétique de la lumière. Si on cherche la contribution d'un volume V à l'effet photoélectrique, quand le potentiel vecteur peut, dans le volume V , être mis sous la forme :

$$A = (ar) \cos \omega t \quad (5)$$

on trouve :

$$c_{kl} = -\frac{e}{m} H_{kl} \frac{\exp 2\pi j(\nu_{kl} - \nu)t}{4\pi j(\nu_{kl} - \nu)} \quad (6)$$

avec :

$$\begin{aligned} H_{kl} &= \int_V \varphi_l^* a \operatorname{grad} \varphi_k \\ h\nu_{kl} &= E_l - E_k \\ \pi\nu_{kl} &= \frac{dc_{kl}/dt}{dt} \end{aligned} \quad (7)$$

représente la probabilité pour qu'un électron dans l'état ψ_k passe dans l'état ψ_l pendant l'unité de temps.

Si la densité de courant \mathbf{j}_l associée à ψ_l n'est pas nulle à l'extérieur du solide, on peut associer, à une transition vers l'état ψ_l , une probabilité d'émission p_l . p_l peut être calculé en comparant le flux de \mathbf{j}_l à travers une surface entourant la photocathode et à travers une section bien choisie du volume V . Le courant photoélectrique I peut être obtenu en faisant la double somme :

$$I = e \sum_{kl} \pi_{kl} p_l. \quad (8)$$

Ce courant est la seule quantité observable, avec la répartition géométrique et énergétique des électrons émis. Il n'y a donc rien d'étonnant à ce que π_{kl} pour un couple kl donné, varie avec le temps et dépende des dimensions du volume V d'une façon analogue.

Les règles de sélection. — c_{kl} prend des valeurs beaucoup plus importantes si k et l satisfont certaines relations, qu'on peut appeler règles de sélection. En raison du volume fini du cristal et du temps d'observation fini, les transitions à considérer dans l'évaluation de I sont celles qui satisfont approximativement ces règles, qui correspondent aux lois de conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement dans le schéma corpusculaire. Les règles de sélection diffèrent suivant l'effet envisagé :

A) EFFET DE SURFACE. — On envisage les contributions, à l'intégrale H_{kl} , du gradient moyen de φ_k qui ne diffère de zéro qu'au voisinage immédiat de la surface. En utilisant l'expression (2) on trouve :

$$H_{kl} = \int_V v_{l_i}^*(\mathbf{r}) \mathbf{a} \cdot \text{grad } v_{k_i}(\mathbf{r}) \exp 2\pi j(k_i - l_i) \mathbf{r} d\tau. \quad (9)$$

La règle de sélection pour l'effet de surface est donc :

$$\begin{cases} v_{kl} = v \\ k_l = l_l \end{cases} \quad (10)$$

Si on peut négliger les variations périodiques de $v_{kl}(\mathbf{r})$, (cas des électrons libres), $\text{grad } v_{kl}(\mathbf{r})$ ne présente pas de composante parallèle à la surface du solide. Il résulte alors de 6, 7, 8, que le courant photoélectrique est proportionnel à a_z^2 , a_z représentant la composante normale de l'amplitude \mathbf{a} du potentiel vecteur.

B) EFFET DE VOLUME. — On envisage la contribution à H_{kl} des variations périodiques de u_k , d'après l'expression 2,

$$H_{kl} = \int_V u_l^*(\mathbf{r}) \mathbf{a} \cdot \text{grad } u_k(\mathbf{r}) \exp 2\pi j(k - l) \mathbf{r} d\tau. \quad (11)$$

Cet effet est nul si l'approximation des électrons libres est valable ($u_k = \text{Cte}$ dans le solide).

La règle de sélection est ici plus sévère que dans l'effet de surface :

$$\begin{aligned} v_{kl} &= v \\ k &= l \end{aligned} \quad (12)$$

mais l'intégrale H_{kl} a des contributions provenant de tout le volume du cristal et plus seulement de la zone superficielle.

Un effet vectoriel est possible, parce que la probabilité d'émission p_l de l'électron excité dépend de la direction du vecteur \mathbf{l} et que la direction de $\text{grad } u_k(\mathbf{r})$ dépend de la direction de $\mathbf{k} \simeq \mathbf{l}$. Mais la composante normale a_z n'est plus forcément la seule active, ni même la plus active.

C) EFFET DE DÉFAUT. — Les défauts internes et superficiels provoquent des perturbations dans $u_k(\mathbf{r})$ et $v_{kl}(\mathbf{r})$ et détruisent leur périodicité. Il en résulte une contribution à H_{kl} . Les règles de sélection et les effets correspondants sont différents de ceux trouvés dans les deux premiers effets.

Conclusion. — La polarisation de la lumière est un test important sur l'origine des électrons dans l'émission photoélectrique. Les résultats expérimentaux déjà obtenus pour certains métaux indiquent un accroissement spectaculaire de l'émission, quand l'angle de la vibration lumineuse avec la surface augmente. Ceci pourrait faire penser à une contribution dominante de l'effet de surface. Toutefois l'argument n'est pas absolument décisif, puisque cet effet vectoriel n'est pas exclusif de l'effet de surface. En fait, d'autres éléments expérimentaux font penser à un effet de volume [2].

Dans les semiconducteurs, on admet généralement que l'effet de volume domine et il serait intéressant de développer les études expérimentales sur l'effet vectoriel.

Section Bourgogne-Franche-Comté.
Séance du 28 avril 1961 à Besançon.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] HUNTINGTON (H. B.) et APKER (L.), *Phys. Rev.*, 1953, **89**, 2, 352.
- [2] MAYER (H.), THOMAS (H.) et METHFESSEL (S.), *Z. Physik*, 1957, **147**, 395 à 464.
- [3] MITCHELL (K.), *Proc. Roy. Soc. London, Ser. A*, 1936, **153**, 513.
- [4] GORLICH (P.) et HORA (H.), *Optik*, 1958, **15**, 116 à 126.